

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم الفيزياء



مذكرة

ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

فرع: فيزياء

تخصص : فيزياء الإشعاعات، كاشف وبصريات إلكترونية

من إعداد : بزيو حليلة

بعنوان :

مساهمة في دراسة توضع الجرافين بتقنية الترسيب الكيميائي للبخار (CVD)

نوقشت يوم: 2015/05/28

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

رئيسا	جامعة ورقلة	استاذ تعليم عال	بوكرام اعمر
ممتحنا	جامعة ورقلة	استاذة مساعدة ا	بله زكية
مشرفا	جامعة ورقلة	استاذة محاضر ب	بابا حني ام الخير
مشرفا مساعدا	جامعة ورقلة	استاذ تعليم عال	خلفاوي فتحي

الموسم الجامعي: 2015/2014

اهداء

إلى حكمتيوعلمي
إلى أدبيوحلمي
إلى طريقي المستقيم
إلى طريق..... الهداية
إلى ينبوع الصبر والتفاؤل والأمل
إلى كل من في الوجود بعد الله ورسوله أمة الغالية
إلى من ضحى براحته من أجل راحتي ... والدي العزيز
إلى سندي وقوتي وملادي بعد الله
إلى من أثروني على أنفسهم
إلى من علموني علم الحياة
إلى من أظهروا لي ما هو أجمل من الحياة إخوتي
إلى من كانوا ملاذي وملجئي
إلى من تذوقت معهم أجمل اللحظات
إلى من سأفنتهم وأتمنى أن يفتقدوني
إلى من جعلهم الله إخوتي بالله و من أحببتهم بالله طلاب قسم الفيزياء
إلى من يجمع بين سعادتي وحزني
إلى من أتمنى أن أذكرهمإذا ذكروني
إلى من أتمنى أن تبقى صورهمفي عيوني

شكر وعرفان

باسم الله ابدأ...و بالحمد والشكران
نعم منك جليلة... أعظمها الصبر والإيمان
منحتني القوة لانجاز...هذا البحث يا خالق الأكون
شكرا والشكر شكران...

ومن باب الاعتراف بالجميل لا يسعنا إلا أن نتقدم ببالح عبارات الشكر والتقدير للاستاذة الفاضلة
"باباحني أم الخير" لمنحني أفضل فرصة علمية بأن تكون مؤطرة لي وتحملها من ذلك عبئا كبيرا
وصبرا طويلا في مختلف مراحل إعداد هذه المذكرة ، والتقدير للبروفسور القدير " فتحي خلفاوي".
و أشكر أيضا للبروفسور الكريم "بوكراج عمر" لقبوله ترؤس لجنة المناقشة، كما أشكر الأستاذة
المحترمة" بلة زكية" لقبولها مناقشة هذه المذكرة وأتمنى أن يفيدوني بأرائهم القيمة والبناءة،
كما أشكر كل أعضاء فريق البحث بمخبر الإشعاع والبلانما وفيزياء السطوح بقسم الفيزياء بجامعة
قاصدي مرياح ورقلة.

فلا يغيب عن خاطرنا إلا أن نتقدم بثلشكر الجزيل إلى الزميلات " فوزية ، سارة، محمد، شعيب، نور،
راضية، فايزة، سعيدة، زينب، حفاف، سومية، صافية، يمينة، بسمينة، سليمة، كنزة"

و كل من ساهم ومدّ لنا يد العون في إنجاز هذا العمل المتواضع .

وشكرا.

فهرس المحتويات

أ	فهرس المحتويات
د	فهرس الجداول
هـ	فهرس الأشكال
2	المقدمة العامة
	الفصل الأول : عموميات حول الجرافين و تقنية CVD
4	I. الجرافين (Graphène)
5	1.I. خصائص الجرافين
6	2.I. طرق إنتاج الجرافين
6	1.2.I. تقنية التقشير الميكرو ميكانيكية (Exfoliation micromécanique)
7	2.2.I. تقنية الترسيب الكيميائي لطور البخار (Chemical vapor Déposition ou CVD)
7	3.2.I. نمو الجرافين على طبقة السيليكون (Croissance sur Si)
7	4.2.I. تحول أكسيد الجرافين (Réduction d'oxyde de graphène)
7	5.2.I. فتح الأنابيب النانو كربونية (Ouverture de nanotubes de carbones)
8	3.I. استخدامات الجرافين
9	II. نظرة عامة على تقنية الترسيب الكيميائي لطور البخار (CVD)
9	1.II. تقنية الترسيب الكيميائي للبخار (CVD)
9	2.II. أنواع المختلفة لتقنية الترسيب الكيميائي لطور البخار (CVD)
10	3.II. شرح الظواهر الناتجة اثناء توضع و نمو طبقة بواسطة الترسيب الكيميائي للبخار (CVD)
10	1.3.II. ظاهرة الامتزاز او الادمصاص (L'adsorption)

11	II.2.3. الانتزاز (Désorption)
12	II.4. آلية النمو لطبقة رقيقة بتقنية الترسيب الكيميائي لطور البخار (CVD)
12	II.5. إنتاج ونمو الجرافين بتقنية PECVD على طبقة من النحاس باستعمال الخليط الغازي (CH ₄ /H ₂)
15	مراجع الفصل الأول
	الفصل الثاني : النمذجة العددية للمعادلات
17	II . المقدمة
17	II .1. تعريف الظاهرة الفيزيائية
17	II.2. حساب تراكيز الجذور CH، CH ₂ ، CH ₃
17	II.2.1. معادلة الاشارة (Equation de diffusion)
18	II.2.2. التفاعلات الكيميائية في حجم المفاعل
21	II.2.3. معامل الانتشار بين نوعين متعادلين كهربائيا
22	II.4.2. قانون بلانك (Loi de Blanc)
23	II.5.2. حل معادلة الانتشار
24	II.3. حساب نسبة التغطية
24	II.3.1. ايزوثرم لونجمير او معادلة لونجمير (Isotherme de langmuir)
25	II.2.3. معدل الترسيب على سطح الركيزة (Taux de déposition)
26	II.3.3. حساب عدد المواقع الموجودة على سطح الركيزة (النحاس)
27	مراجع الفصل الثاني

الفصل الثالث: مناقشة وتحليل النتائج	
30	III . مقدمة
30	1.III. النتائج عند درجة الحرارة $T_1 = 1103 \text{ K}$
30	1.1.III. تراكيز الجذور المساهمة في نمو طبقة الجرافين عند الضغط $P_3 = 1.33 \text{ Pa}$
32	2.1.III. معدل التغطية بالجذور CH ، CH_2 ، CH_3
34	2.III. النتائج عند درجة الحرارة $T_2 = 1033 \text{ K}$
36	3.III. النتائج عند درجة الحرارة $T_3 = 973 \text{ K}$
38	4.II. المقارنة مع نتائج منحنيات ايزوثرم لونجمير
40	الخلاصة العامة

فهرس الجداول

	الفصل الأول : عموميات حول الجرافين و تقنية CVD
9	الجدول I. 1: انواع المختلفة لتقنية الترسيب الكيميائي لطور البخار (CVD) ودرجة الحرارة المستعملة في كل نوع
	الفصل الثاني : النمذجة العددية للمعادلات
19	الجدول II. 1: التفاعلات الكيميائية و ثابت السرعة الموافق لكل تفاعل.
19	الجدول II. 2: التفاعلات للانواع الكيميائية في حجم المفاعل و ثابت السرعة الابتدائي.
19	الجدول II. 2: 1: ثابت السرعة بوحدة " m ³ /s ".
22	الجدول II. 3: القيم العددية لضوابط لينارد جونز (Paramètres Lennard–Jones) و استقطابية (polarisabilités) والكتلة كل فرد كيميائي.
	الفصل الثالث: مناقشة وتحليل النتائج
32	الجدول III. 1: مساحة خلية سداسية واحدة للجرافين و عدد المواقع المتواجدة على مساحة 1 متر مربع من سطح الركيزة .
32	الجدول III. 2: تراكيز الجذور، معدل الترسيب و الضغط الكلي للغاز.
35	الجدول III. 3: تراكيز الجذور، معدل الترسيب و الضغط الكلي للغاز.
36	الجدول III. 4: تراكيز الجذور، معدل الترسيب و الضغط الكلي للغاز.
37	الجدول III. 5: يعطي معدل التغطية ودرجة الحرارة الموافقة له.
37	الجدول III. 6: سرعة التغطية (V) عند شروط معينة

فهرس الأشكال

	الفصل الأول : عموميات حول الجرافين و تقنية CVD
4	الشكل 1.I: بنية الجرافين
6	الشكل 2.I : بنية الجرافين ، بنية الانابيب النانو كربونية و بنية الجرافيت .
7	الشكل 3.I: إنتاج الجرافين من أكسيد الجرافين.
8	الشكل 4.I : تشكل الجرافين من الانابيب النانو كربونية .
11	الشكل 5.I. آلية لونجمير-هنشلوود.
11	الشكل 6.I. آلية إيلي-ريديال .
11	الشكل 7.I. الية هاريس- لكازيمو.
12	الشكل 8.I. آلية الامتزاز الناجم عن التصادمات.
12	الشكل 9.I : مراحل توضع تقنية CVD.
14	الشكل 10.I : تولد البلازما عن طريق ترددات الراديو RF في وسط المفاعل.
	الفصل الثاني : النمذجة العددية للمعادلات
23	الشكل 1.II: المفاعل PECVD .
24	الشكل II. 2 : تتوضع الذرات على المواقع لتشكيل طبقة أحادية .
25	الشكل II. 3 : معدل التغطية بدلالة ضغط الغاز (منحنيات ايزوثرم ليجميور) و بدلالة درجة الحرارة.
26	الشكل II. 4 : ابعاد خلية سداسية للجرافين

	الفصل الثالث: مناقشة وتحليل النتائج
30	الشكل III.1 : تركيز الجذور CH_3 بدلالة المسافة بين قطبي المعامل .
31	الشكل III.2 : تراكيز الجذور CH_2 بين قطبي المعامل .
31	الشكل III.3 : تراكيز الجذور CH بين قطبي المعامل .
33	الشكل III.4 : معدل التغطية بدلالة الضغط خلال مدة زمنية 12 ثانية
33	الشكل III.5 : معدل التغطية بدلالة الضغط خلال مدة زمنية 120 ثانية.
34	الشكل III.6 : معدل التغطية بدلالة الضغط خلال مدة زمنية 240 ثانية .
35	الشكل III.7 : معدل التغطية بدلالة الضغط خلال مدة زمنية 240 ثانية .
36	الشكل III.8 : معدل التغطية بدلالة الضغط خلال مدة زمنية 240 ثانية .
38	الشكل III.9 : معدل التغطية بدلالة ضغط الغاز (منحنيات ايزوثرم لونيومبيور) و بدلالة درجة الحرارة.

المقدمة العامة

المقدمة العامة

تستخدم الطبقات الرقيقة في مختلف المجالات الصناعية خاصة في الصناعات الالكترونية حيث تستعمل في صنع الخلايا الشمسية، الشاشات المسطحة، صناعة الحواسيب، الهواتف النقالة وصناعة الطائرات..... الخ. توجد عدة طرق لإنتاج هذه الطبقات الرقيقة منها: الترسيب الكيميائي لطور البخار CVD و الترسيب الفيزيائي لطور البخار PVD .

إن الجرافين من المواد المكتشفة حديثا في سنة 2004، و يمتلك طبقة رقيقة ثنائية الأبعاد مكونة من ذرات الكربون النقية، كما لها مزايا استثنائية تجعلها محط اهتمام الباحثين والصناعيين. يمكن إنتاج الجرافين بتقنية الترسيب الكيميائي لطور البخار بتحفيز البلازما (PECVD). تعد تقنية PECVD من أكثر الطرق استعمالا لتوضع الطبقات الرقيقة، حيث تقدم هذه التقنية عدة مزايا أهمها معدلات ترسيب عالية للأفراد الكيميائية..... الخ.

في هذه الدراسة نتعرف على هذه المادة الجديدة (الجرافين) حيث نبرز خصائصها الإستثنائية، نتعرف على بنيتها وبعض إستعمالاتها و نقدم بعض الطرق لإنتاجها. كما نهدف إلى حساب معدلات تغطية ركيزة من النحاس بطبقة من الجرافين بتقنية PECVD بعد حساب تراكيز الأفراد الكيميائية المساهمة في إنتاج طبقة الجرافين، و قد قسمت المذكرة إلى ثلاثة فصول. في الفصل الأول: سنقوم بتقديم معلومات عامة عن الجرافين ت شمل تعريفها، خصائصها، إستخداماتها و ذكر أهم الطرق التي تساهم في إنتاج الجرافين. كما نبين كيفية إنتاج الجرافين بتقنية PECVD .

في الفصل الثاني: سنقوم بحساب تراكيز بعض الجذور المساهمة في نمو الجرافين بتقنية PECVD، ذلك لهدف حساب نسبة تغطية الركيزة بالجرافين من خلال حساب معدلات ترسيب هذه الجذور على السطح. حيث سنقوم بحل معادلة الإنشار لكل الأفراد الكيميائية الموجودة في حجم المفاعل، و وقع اختيارنا على طريقة الفروق المنتهية في حل هذه المعادلة.

الفصل الثالث : سنقوم بتحليل و مناقشة منحنيات معدلات تغطية الركيزة بالجرافين التي سنتحصل عليها ونفسر تأثير

شروط التجربة على معدلات التغطية من درجة حرارة الركيزة و الضغط الكلي للغاز..... الخ.

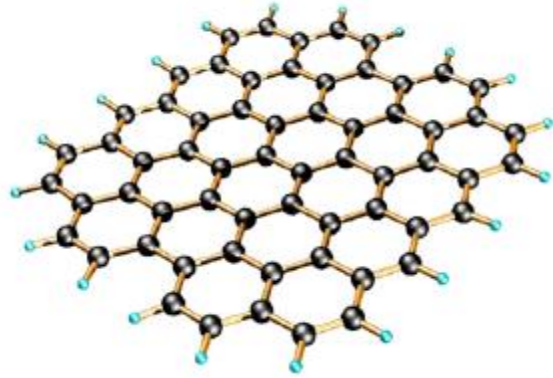
الفصل الأول :

عموميات حول الجرافين و تقنية CVD

الفصل الأول : عموميات حول الجرافين و تقنية PECVD**1. الجرافين (Graphène) :**

تم عزل الجرافين (Graphène) من الجرافيت ودراسته في عام 2004م من طرف العالمين كوستيا نوفوسيلوف (Kostya Novoselov)، واندريه جييم (Andre Geim)، في جامعة مانشستر . في عام 2010 تحصل كل من العالمين على جائزة نوبل في الفيزياء لقيامهما بتجارب على بنية الجرافين ، فتمكنا من تسجيل خصائص يمتاز بها الجرافين عن بقية المعادن. كالألماس والنحاس.... الخ [1].

الجرافين هو الاسم الذي يطلق على أحادي الطبقة المستوية ذات التهجين من نوع SP^2 [2]. فالجرافين هو مادة ثنائية الأبعاد (bidimensionnel : 2D)، يتألف من ذرات الكربون النقية فقط التي تكون مرتبة في شبكة سداسية منتظمة مشابهة لبيوت النحل المتراصة. إن الجرافين يعد وحدة البناء الأساسية لمادة الجرافيت SP^3 ، و لكن بنيته الالكترونية مختلفة عن بنية الجرافيت. الجرافين هو أحد المواد النانو كربونية [1].



الشكل 1.1 : بنية الجرافين [2].

إن تجمع العديد من مستويات الجرافين فوق بعضها البعض يعطي لنا الجرافيت المادة الموجودة في قلم الرصاص، و هو معدن ثلاثي الأبعاد (متعدد الطبقات) [1]. يتم فصل مستويات الجرافين في الجرافيت بمسافة 3.4 \AA عن بعضها البعض. إن القوى التي تربط هذه المستويات هي قوى فان دير فالز الضعيفة (Van der Waals) [2].

1.1. خصائص الجرافين :

لقد أثار الجرافين إعجاب الباحثين و ذلك من حيث الخصائص التي ينفرد و يتميز بها و إمكانية استغلالها و إيجاد تطبيقات واسعة لها في مجال الالكترونيات و الفيزياء و الكيمياء و علم المواد خاصة [3]، [4] . إن الجرافين ينفرد بخصائص و مزايا استثنائية أهمها :

1/ بنية الجرافين بسيطة جعلته مادة سهلة التصنيع [4].

2/ وحدة قياس سمك الجرافين هي من رتبة النانومتر (nm)، فهو من المواد المتناهية الصغر ذو طبقة رقيقة جدا، مرنة و

شفافة [4]

3/ الخصائص الالكترونية للجرافين وجدت اهتماما كبيرا من طرف الباحثين خاصة في التطبيقات التقنية وذلك لان حركية

الالكترونات في الجرافين تفوق كثيرا حركيتها في السيليسيوم (Si)، الذي كان العنصر الأفضل ناقلية على الإطلاق قبل

اكتشاف الجرافين في سنة 2004 [1].

4/ الروابط الكيميائية بين ذرات الكربون المشكلة للجرافين قوية جدا فهي روابط تساهمية أو تكافؤية مما يجعله يمتاز بالمتانة

والصلابة [4].

5/ طبقات الجرافين خالية من العيوب وهي ذات جودة عالية [4].

6/ ويعتبر الجرافين كالجرافيت نوعا من أنواع الرصاص من حيث اللمعان والمرونة [1].

7/ كان للعالمين كوستيا نوفوسيلوف و اندريه جيميم فضلا في اكتشاف الناقلية الكهربائية الممتازة للجرافين رغم بنيته الثنائية

الابعاد فهو مادة استثنائية حارقة للعادة [1].

8/ معدل الامتصاص نظريا لطبقة واحدة من الجرافين هو 2.3% (للطول الموجي 550 نانومتر)، و الجرافين يعكس جزءا

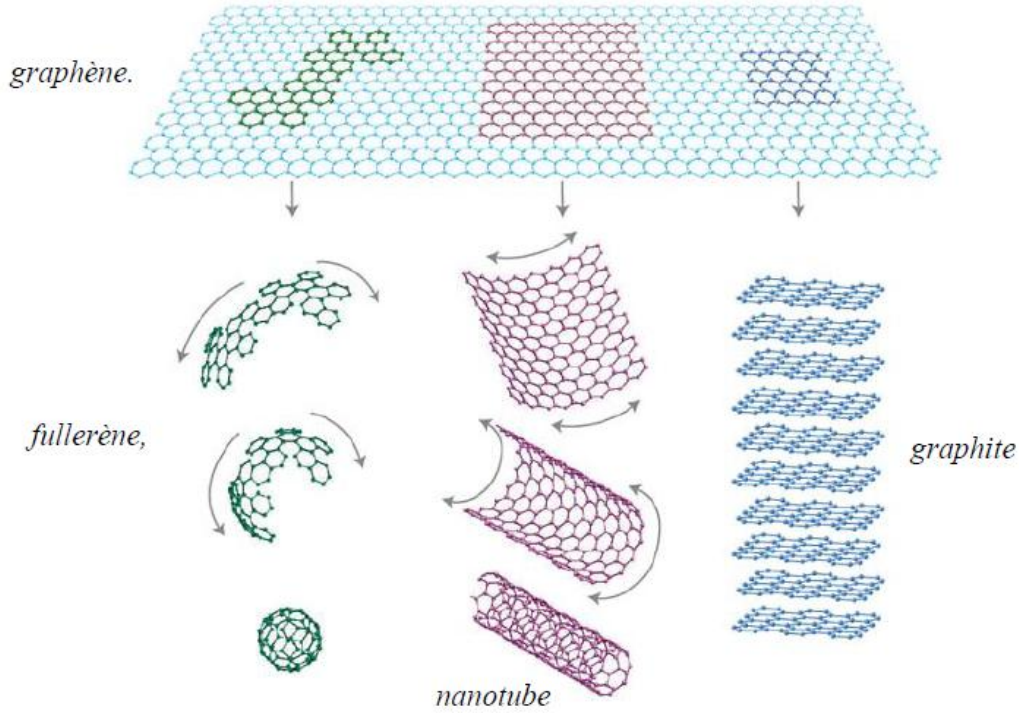
صغيرا جدا من الضوء المرئي الساقط عليه (اقل من 0.1%) [2].

9/ حركية الشحنات $2.00.10^5 cm^2 V^{-1} S^{-1}$ ، اكبر قيمة معروفة خلال سنة 2013 [3].

2.1. طرق إنتاج الجرافين :

يمكن أن يتم تركيب الجرافين باستخدام تقنيات إنتاج مختلفة، وهي تشبه التقنيات المستخدمة في إنتاج مواد الفلورين

(les fullerènes)، و الأنابيب النانو كربونية (les nanotubes de carbone).



الشكل 2.1 : بنية الجرافين، بنية الأنابيب النانو كربونية و بنية الجرافيت [2].

من بين هذه التقنيات :

1.2.1. تقنية التقشير الميكرو ميكانيكية (Exfoliation micromécanique) :

هذه التقنية هي واحدة من أبسط الطرق المستعملة، وهي لا تحتاج إلى درجة حرارة عالية، وعلاوة على ذلك يتم إنتاج

الجرافين بهذه التقنية من الجرافيت بخطوة واحدة وذلك بإيجاد وسيلة للحد من قوى فان دير فالز الضعيفة بين صفائح الجرافين.

إن الجرافيت مادة طبيعية واسعة الانتشار، و طبقات الجرافين المنتجة بهذه التقنية عالية الجودة، إلا أن العيب في هذه التقنية هو

أن الكمية المنتجة من الجرافين قليلة جدا [2] .

2.2.1. تقنية الترسيب الكيميائي لطور البخار

: (Chemical Vapor Déposition ou CVD)

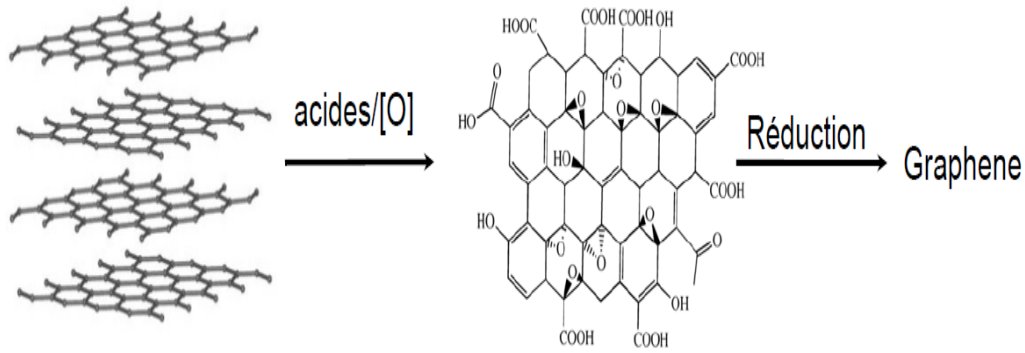
تمكن هذه التقنية من إنتاج الجرافين أحادي الطبقة بكميات كبيرة (نسبة متعدد الطبقات اقل من 5%)، و يتم استعمال معادن محفزة (الركيزة)، في هذه التقنية قد تكون إما النحاس أو النيكل.... الخ، و التي قد يتم إزالتها بعد تشكل الجرافين على سطحها و نقل الجرافين إلى معدن آخر عبر مراحل معينة. تكون الطبقات المنتجة للجرافين ذات جودة عالية [2].

3.2.1. نمو الجرافين على طبقة السيلكون (Croissance sur Si)

هذه التقنية من الطرق الأكثر استعمالا، و تتيح إعداد كميات كبيرة من الجرافين ذات جودة عالية [2].

4.2.1. تحول أكسيد الجرافين (Réduction d'oxyde de Graphène)

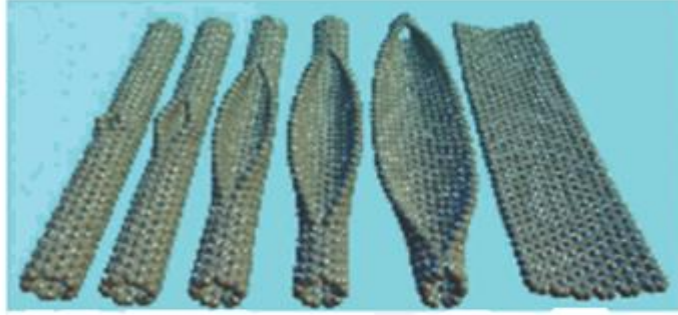
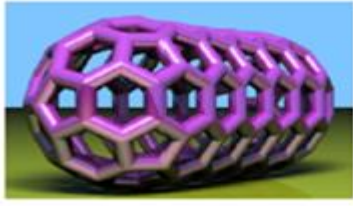
يمكن توضيح هذه التقنية بالمخطط التالي [2] :



الشكل 3.1 : إنتاج الجرافين من أكسيد الجرافين [2].

5.2.1. فتح الأنابيب النانو كربونية (Ouverture de nanotubes de carbones)

في هذه الطريقة يتم فتح الأنابيب النانو كربونية في إنتاج الجرافين ونحصل على كميات صغيرة جدا من الجرافين [2].



الشكل 4.I : تشكل الجرافين من الانابيب النانو كربونية [2].

هناك طرق أخرى لم يتم ذكرها لإنتاج الجرافين، ولكنها أقل شيوعاً واستعمالاً من بينها: التركيب العضوي الخ [3].

3.1. استخدامات الجرافين :

جذب الجرافين مؤخراً اهتمام العلماء و الباحثين و الصناع بين نظراً لخصائصه الرائعة والتطبيقات المحتملة له [5]، و

نذكر منها:

1/ يستخدم الجرافين في المركبات الكيميائية، حيث يتم مثلاً دمج الجرافين مع مواد أخرى لأنه يعتبر المعدن الذي له الناقلية

الحرارية الأعلى و هذه الخاصية استنتجت خلال سنة 2011 [5].

2/ في مجال النانو إلكترونيات يعد الجرافين محتمل الاستعمال في تخزين الطاقة في الأجهزة الالكترونية بكفاءة عالية [5].

3/ الجرافين مادة مثالية الاستعمال للتطبيقات في الأجهزة الكهربائية كالنواقل الكهربائية، المكثفات، المقاومات، البطاريات،

خلايا الوقود، و أجهزة الاستشعار عن بعد [6].

4/ يمكن تصنيع أجهزة الاستشعار عن بعد باستعمال قاعدة من الجرافين للكشف عن العلامات البيولوجية المتعلقة بالخلايا

السرطانية و هذا في علم البيولوجيا [2].

5/ يمكن دمج صفائح الجرافين مع المواد المستعملة في الطلاء والتغليف، و ذلك لتعزيز و تعديل الخصائص الكهربائية لهذه المواد

المستعملة، و خاصة في الترانزستورات ذات الترددات العالية التي تستعمل في الحواسيب والهواتف النقالة، و الترانزستورات من

المكونات الأساسية للأجهزة البصرية الالكترونية وهي ذات أهمية كبيرة. من بين هذه الأجهزة البصرية الالكترونية: المصابيح،

الشاشات التي تعمل باللمس، الخلايا الشمسية و أجهزة الاستشعار البصرية [2].

II. نظرة عامة على تقنية الترسيب الكيميائي لطور البخار (CVD) :

1.II. تقنية الترسيب الكيميائي للبخار (CVD) : هي تقنية لتشكيل طبقة رقيقة من المواد الصلبة على مادة أخرى

(الركيزة: Substrat)، من خلال التفاعلات للأفراد الكيميائية القريبة من سطح الركيزة مع سطح هذه الركيزة [7]، [8] .
 أسهم التقدم التكنولوجي في إنتشار العديد من الاستعمالات لتقنية CVD خاصة في البصريات (الألياف البصرية) ، أشباه
 الموصلات ومعالجة المواد (معالجة السليكون) . أو إنتاج طبقات رقيقة لأغراض معينة مثل إنتاج الجرافين الذي يتميز بخواص
 فريدة [10].

تعتمد طريقة CVD على الظروف التجريبية المستعملة التي من بينها اختيار الركيزة من حيث مدى تفاعلها مع المواد
 الغازية، درجة حرارة تسخين الركيزة، نوع الخليط الغازي المتدفق، الضغط الكلي للغاز ، وما إلى ذلك. إن الاختلاف في هذه
 الظروف ينجم عنه زرع مواد ذات خصائص مختلفة من المواد المستعملة كركيزة: النحاس والنيكل... الخ [10].

II.2. أنواع المختلفة لتقنية الترسيب الكيميائي لطور البخار (CVD):

الجدول I. 1: أنواع المختلفة لتقنية الترسيب الكيميائي لطور البخار (CVD) و درجة الحرارة المستعملة في كل نوع [9].

تقنيات CVD	مجال درجة الحرارة
ترسيب الكيميائي لطور البخار بتحفيظ البلازما (PECVD).	أدنى قيمة لدرجة الحرارة هي للغاز 400 °C
ترسيب الكيميائي لطور البخار بالليزر (LCVD).	درجة حرارة الركيزة 500°C-2500 °C
ترسيب الكيميائي لطور البخار بالضغط الجوي (APCVD).	درجة حرارة الركيزة 400°C - 1100°C
ترسيب الكيميائي لطور البخار بالضغط الجوي بضغط المنخفض (LPCVD).	درجة الحرارة حوالي 550°C
ترسيب الكيميائي لطور البخار بتحفيظ بواسطة الأسلاك الساخنة (Hot-ire CVD).	درجة حرارة السلك تتراوح بين 2027°C - 1625°C

II. 3. شرح الظواهر الناتجة اثناء توضع و نمو طبقة بواسطة الترسيب الكيميائي للبخار CVD :

II.3.1. ظاهرة الامتزاز او الادمصاص (L'adsorption) :

الامتزاز هو ظاهرة شائعة جدا تحدث عند تلامس جزيئات الغاز أو السائل مع سطح المادة الركيزة، فيحدث تفاعلات كيميائية بين هذه الجزيئات و ذرات السطح، مما يؤدي إلى الاحتفاظ ببعض الذرات و توضعها على السطح أما باقي الذرات فتنتشر بعيدا عن السطح [8] .

ينبغي عدم الخلط بين الامتزاز Adsorption و الامتصاص Absorption، فالامتزاز هو ظاهرة تحدث مع سطح الركيزة، و تتم كل التفاعلات على السطح، و أما الامتصاص فهو ظاهرة تحدث في داخل الركيزة، أي أن الغازات أو السوائل تتوغل إلى داخل المادة الركيزة، و تتم كل التفاعلات الكيميائية في الداخل. التفاعلات التي تحدث في ظاهرة الامتزاز قد تكون فيزيائية أو كيميائية ولذلك نميز نوعين للامتزاز هما: الامتزاز الفيزيائي و الامتزاز الكيميائي [8]:

• الامتزاز الفيزيائي (Adsorption Physique) :

تكون طاقة الربط الفيزيائية بين الجزيئات اقل من طاقة الربط في الامتزاز الكيميائي، و القوى الرابطة بين جزيئات سطح المادة الركيزة و الغازات المترسبة هي قوى فاندر فالز (Van der Waals). يتميز هذا الامتزاز بتكوين عدة طبقات ذرية على سطح المادة الركيزة [8].

• الامتزاز الكيميائي (Adsorption Chimique) :

تكون طاقة الربط الكيميائية بين الجزيئات اكبر من الطاقة في الامتزاز الفيزيائي، يتميز هذا النوع من الامتزاز بتكوين روابط كيميائية بين السطح الركيزة و الذرات أو الجزيئات المترسبة عليها، و يصاحب هذا النوع من الامتزاز تكون طبقة أحادية الذرات على السطح الركيزة. الامتزاز الكيميائي ينطوي على تبادل بين الكثرونات الركيزة و الجزيئات المترسبة كما في حالة التفاعلات الكيميائية و ينتج عن هذه الظاهرة تعديل في خصائص المادة الصلبة حيث تتوضع ذرات جديدة على السطح [8].

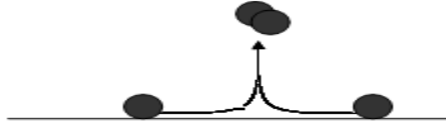
II.2.3. الانتزاز (Désorption) :

ظاهرة الانتزاز تشبه ظاهرة الامتزاز فهي ظاهرة يتم خلالها تفاعلات بين سطح الركيزة وجزيئات الغازات او السائل ، كذلك ولكن الاختلاف بين الظاهرتين هو انه في هذه الظاهرة (الانتزاز) تنتشر الغازات او الذرات الناتجة من التفاعلات الكيميائية بعيدا عن السطح، اما في الامتزاز فتتجه هذه الجزيئات نحو سطح الركيزة.

و نميز اربع اليات للانتزاز (Mécanismes de Désorption) [8] :

- آلية لونجمير-هنشلوود (Mécanisme 'Langmuir-Hinshelwood') (LH).

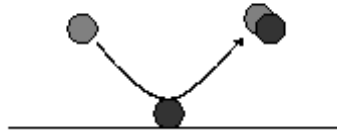
تتم هذه الالية وفق الشكل 5.I. المبين كالتالي :



الشكل 5.I. آلية لونجمير-هنشلوود.

- آلية إيلي-ريديال (Mécanisme d'Eley-Rideal).

تتم هذه الالية وفق الشكل 6.I. المبين كالتالي :



الشكل 6.I. آلية إيلي-ريديال.

- آلية هاريس-كازيمو (Mécanisme de Harris- Kasemo).

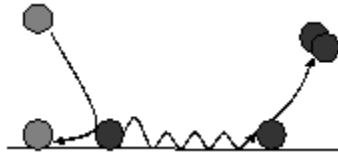
تتم هذه الالية وفق الشكل 7.I. المبين كالتالي :



الشكل 7.I. الية هاريس-كازيمو.

- آلية الامتزاز الناجم عن التصادمات (Mécanisme de Désorption Induite Par Collision).

تتم هذه الالية وفق الشكل 8.I. المبين كالتالي :

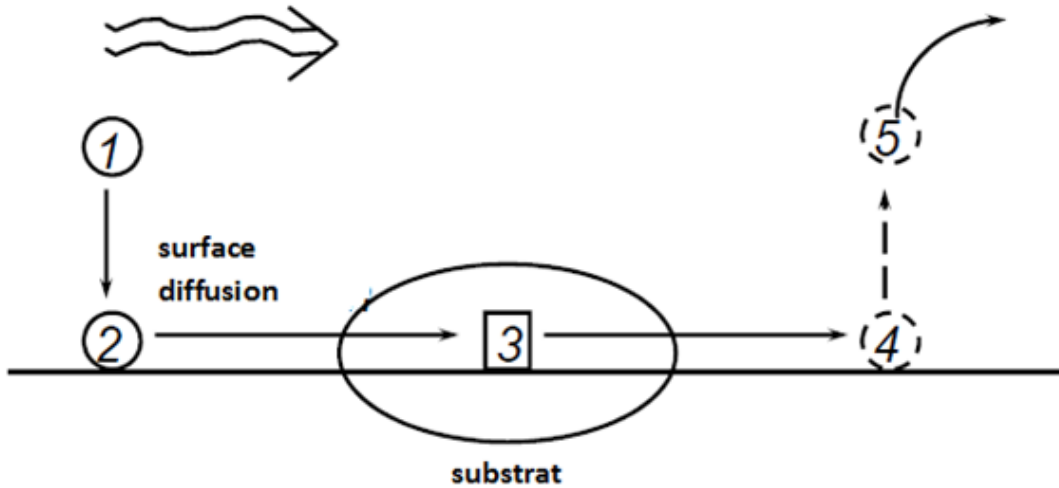


الشكل 8.I. آلية الامتزاز الناجم عن التصادمات.

4.II. الية النمو لطبقة رقيقة بتقنية الترسيب الكيميائي لطور البخار (CVD):

مراحل التوضع بتقنية CVD [10]:

- 1/ انتشار المتفاعلات الكيميائية على السطح (Substrat).
- 2/ تتوجه المواد المتفاعلة نحو السطح (L'adsorption).
- 3/ حدوث تفاعلات كيميائية على السطح (Substrat).
- 4/ انتشار الغازات الناتجة من التفاعلات الكيميائية بعيدا عن السطح (Désorption).
- 5 / خروج الغازات من حجم المفاعل.



الشكل 9.I : مراحل توضع بتقنية CVD [10].

5.II. إنتاج و نمو الجرافين بتقنية PECVD على طبقة من النحاس باستعمال الخليط الغازي : (CH₄/H₂)

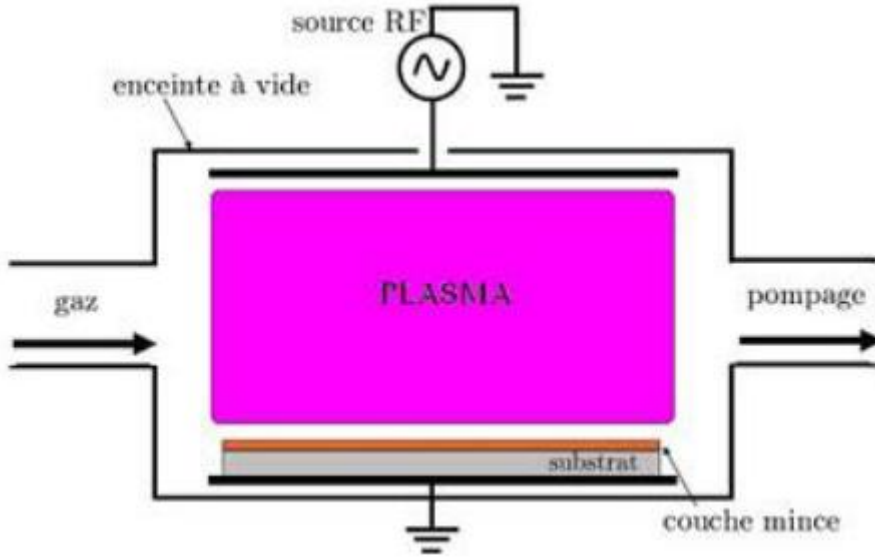
طريقة الترسيب الكيميائي للبخار من بين الطرق المستعملة بكثرة لإنتاج الجرافين بأنواعها المختلفة بسبب التكلفة

المنخفضة لهذه التقنية ولكونها ذات كفاءة عالية [11].

تقنية PECVD : هي واحدة من تقنيات الترسيب الكيميائي للبخار CVD، تسمح بنمو الطبقات في درجات حرارة منخفضة، في هذه الطريقة يتم تفكك الغازات المتفاعلة بواسطة الالكترونات المتواجدة في البلازما، و يمكن أن تتولد البلازما إما عن طريق ترددات الراديو (RF) الأكثر استخداما في مجال الالكترونات الدقيقة أو غيرها من التقنيات [7]. أصبح النحاس على وجه الخصوص الأكثر استخداما على نطاق واسع في إنتاج الجرافين، بسبب سهولة انتشار ذرات الكربون على سطح النحاس مما يسهل عملية نمو الطبقات الرقيقة، إضافة إلى كون النحاس متوفر بكثرة و غير مكلف [12]. نمو الجرافين على النحاس باستخدام غاز الميثان (CH_4) كمصدر لذرات الكربون وغاز الهيدروجين (H_2) أو الأرجون (Ar)، شروط الانتاج هي [11]:

- 1/ تسخين طبقة النحاس الركيزة إلى درجة الحرارة اللازمة لنمو الجرافين وهي تكون بين $700^{\circ}C - 830^{\circ}C$ ($973K$) إلى $1103K$)، و معدل التسخين لمادة الركيزة هو $3^{\circ}C$ في كل ثانية أي $3^{\circ}C/s$.
- 2/ عند الوصول إلى درجة الحرارة لنمو الجرافين، يتم تدفق مستمر لكل من الغازات CH_4/H_2 إلى حجم المفاعل، معدل تدفق الهيدروجين هو $40 sccm$ (40 سم^3 في كل دقيقة) أو من الأرجون، و الميثان بتدفق $1 sccm$ ، أي أن نسبة CH_4 هي : 2.43% و نسبة الهيدروجين هي: 97.56% .
- 3/ يتم الإبقاء على الضغط الكلي بمقدار $10mTor$ خلال مرحلة نمو الجرافين أي $1.33 Pa$.
- 4/ تقدر الاستطاعة في وسط البلازما $10W - 200W$. يستغرق نمو الجرافين $0.2 - 4$ دقائق.
- 5/ يتم تبريد العينة سريعا إلى درجة حرارة الغرفة ($25^{\circ}C$) و معدل التبريد $3^{\circ}C/s$ عن طريق إيقاف طاقة التسخين [11].

يبين الشكل 10.I مخطط من بين مخططات المفاعلات التي تستعمل البلازما في إنتاج الطبقات الرقيقة.



الشكل 10.I : تولد البلازما عن طريق ترددات الراديو RF في وسط المفاعل [13].

مراجع الفصل الأول

[1] J. N. Fuchs, M. O. Goerbig et B. Plaçais ; « Le graphène : Quand la mécanique quantique rencontre la relativité dans un trait de crayon » ; Reflets de la Physique , N° 25, pp 4-9.

[2] J. Azevedo ; « Assemblage controlé de graphéne et de nanotubes de carbone par transfert de films de tensioactifs pour le photovoltaïque» ; Thèse de Doctorat ; Université de Paris-Sud (2013).

[3] H. J. Shin, W. M. Choi, D. Choi, G. H. Han, S. M. Yoon, H. K. Park, S. W. Kim, Y. W. Jin, S. Y. Lee, J. M. Kim, J. Y. Choi, and Y. H. Lee; « Control of Electronic Structure of Graphene by Various Dopants and Their Effects on a Nanogenerator » ; J. American Chemical Society , **132** , pp 15603–15609 (2010).

[4] K. M. Al-Shurman , H. Naseem ; «CVD Graphene Growth Mechanism on Nickel Thin Films» ; Excerpt from the Proceedings of the 2014 COMSOL Conference in Boston (2014).

[5] W. Lv , F. Sun , D. M. Tang , H. T. Fang , Ch. Liu, Q. H. Yang and H. M. Cheng ; « A sandwich structure of graphene and nickel oxide with excellent supercapacitive performance» ; Journal of Materials Chemistry ; J. Mater. Chem. , **21** , pp 9014–9019 (2011).

[6] D. Geng , S. Yang , Y. Zhang , J. Yang , J. Liu , R. Li , T. K. Sham, X. U. Sun, S. Ye, S. Knights; «Nitrogen doping effects on the structure of grapheme » ; Applied Surface Science , **257** , pp 9193– 9198 (2011).

[7] O. Babahani et F. Khelfaoui ; «Calcul des concentrations de molécules et de radicaux lors de déposition de couches minces a-Si:H par procédés PECVD» ; *Université Kasdi Merbah Ouargla* ; Annales des Sciences et Technologie, Vol. 4, N° 2, pp 115-117 (2012).

[8] O. Babahani ; «Simulation numérique par la méthode de Monte Carlo de la déposition de couches minces par procédés CVD» ;Thèse de Doctorat , *Université Kasdi Merbah Ouargla* (2013).

[9] **K. H. O. Keltoum** ; «Contribution a l'étude par la simulation numérique de Dynamique Moléculaire de la croissance des couches minces par procédé PECVD » ; Thèse de Magister , *Universite Kasdi Merbah Ouargla* (2013).

[10] N. Cheung , U. C. Berkeley ; «Chemical Vapor Deposition (CVD) »; Lecture 13, **EE143** , pp5 (2010).

[11] Y. S. Kim , J. H. Lee , Y. D. Kim , S. K. Jerng , K. Joo , E. Kim , J. Jung , E. Yoon , Y. D. Park , S. Seo , S. H. Chun; « Methane as an effective hydrogen source for single-layer graphene synthesis on Cu foil by plasma enhanced chemical vapor deposition».

[12] T. F. CHUNG , T. SHEN , H. CAO , L. A. JAUREGUI, WEI WU, Q. YU et D. NEWELL, A. Y. P. CHEN ; « Synthetic Graphene Grown by Chemical Vapor Deposition on Copper Foils».

[13] R. Berrhouma ; « Calcul des densités des espèces chimiques existantes dans la phase gazeuse lors de la déposition d'une couche mince a:C-H par les procédés PECVD » ; Mémoire de Master, *Universite Kasdi Merbah Ouargla* (2014).

الفصل الثاني :

النمذجة العددية للمعادلات

الفصل الثاني: النمذجة العددية للمعادلات**II . المقدمة :**

في هذا الفصل نركز على حساب تراكيز الأنواع الكيميائية المختلفة المشاركة في ترسب طبقة رقيقة بواسطة عملية PECVD وحساب نسبة تغطية سطح الركيزة بهذه الطبقة المترسبة ، حيث تمكنا من حساب التراكيز وذلك بالاعتماد على النمذجة الرياضية لمعادلة الانتشار، بطريقة عددية لحل المشكلة. وقد وقع اختيارنا على طريقة الفروق المنتهية و خوارزمية غوص-صيدل. لحساب نسبة التغطية على مساحة 1 متر مربع من سطح الركيزة استخدمنا معادلة لونغمير، قمنا بحساب معدل الترسيب خلال مدة زمنية محددة وحساب عدد المواقع الموجودة على سطح الركيزة (1 متر مربع).

II .1. تعريف الظاهرة الفيزيائية :

الغاز الذي أدخل إلى المفاعل هو خليط من الغازين (CH_4 / H_2)، حيث تتدخل الإلكترونات المتواجدة في البلازما لتفكيك جزيئات المزيغ الغازي عن طريق التصادمات والتفاعلات الكيميائية في حجم المفاعل . ينتج عن هذه العملية تشكل العديد من الجذور والجزيئات والايونات. من العناصر التي تشارك في التفاعلات الكيميائية الجزيئات H_2 ، CH_4 ، C_2H_6 و الجذور: CH_3 ، CH_2 ، CH ، H ، C_2H_5 . يحدث بالقرب من سطح الركيزة (النحاس) العديد من التفاعلات الكيميائية التي تؤدي إلى نمو وتشكل طبقة الجرافين الرقيقة بتقنية (PECVD). من الجذور المساهمة في نمو الطبقة الكيميائية الجذور: CH ، CH_2 ، CH_3 .

II.2. حساب تراكيز الجذور CH ، CH_2 ، CH_3 :**II.2.1. معادلة الانتشار (Équation de diffusion) [1] :**

قمنا بحساب تراكيز الجذور (Radicaux) المساهمة في نمو طبقة الجرافين، وذلك باستعمال معادلة الانتشار لكل جذر من الأنواع المختلفة المنتشرة في حجم المفاعل وفق المحور x (l'axe x) حيث اعتبرنا أن الانتشار على المحاور (y) و (z) مهملاً.

معادلة الانتشار (قانون فيك : Loi de Fick) تكتب على الشكل التالي :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D_m \frac{\partial C_m}{\partial x} \right) + R_m = 0 \dots \dots (1.II).$$

D_m : معامل الانتشار.

R_m : معدل الإنتاج (أو الاستهلاك) في وحدة الحجم .

C_m : هو تركيز النوع m .

نرفق كل قيمة للرمز m بنوع كيميائي كالتالي :

$m=1$ من اجل CH_4 ، $m=2$ من اجل CH_3 ، $m=3$ من اجل CH_2 ، $m=4$ من اجل CH ، $m=5$ من اجل

H ، $m=6$ من اجل H_2 ، $m=7$ من اجل C_2H_5 ، $m=8$ من اجل C_2H_6 .

2.2.II. التفاعلات الكيميائية في حجم المفاعل :

إن التفاعلات الكيميائية المسؤولة عن ترسب طبقة رقيقة متشكلة من الجرافين على سطح النحاس يغطي في كل من

الجدول (1.II) و الجدول (2.II). يعطي الجدول 1.II. التفاعلات الكيميائية لتفكك الجزيئات بتأثير الإلكترونات مع ثابت

السرعة الموافق لكل تفاعل. يعطي الجدول [2] . II . 2. التفاعلات للأنواع الكيميائية في حجم المفاعل و ثابت السرعة عند درجة

الحرارة

$$K = K_0 \left(\frac{T_g}{298} \right)^n \exp \left(- \frac{E_a}{RT_g} \right) \dots (2.II) \dots [3]$$

حيث تمثل :

K_0 : ثابت التفاعل الابتدائي.

T_g : درجة حرارة الغاز.

E_a : طاقة التنشيط.

R : ثابت الغازات المثالية.

n : عدد ثابت.

الجدول 1.II : التفاعلات الكيميائية و ثابت السرعة الموافق لكل تفاعل [2].

التفاعلات الكيميائية (Reaction)	ثابت التفاعل m^3/s (K)
$CH_4 + e \longrightarrow CH_3 + H + e$	$K1=4.5*10^{-14}$
$CH_4 + e \longrightarrow CH_2 + H_2 + e$	$K2=7.3*10^{-9}$
$CH_4 + e \longrightarrow CH + H_2 + H + e$	$K3=3.7*10^{-15}$
$H_2 + e \longrightarrow 2H + e$	$K4=2.00*10^{-14}$

الجدول II. 2 : التفاعلات للانواع الكيميائية في حجم المفاعل و ثابت السرعة الابتدائي [3].

Réaction chimique	K_0 (m^3/s)	n	E_a/RT_g
$CH_3 + CH_3 \rightarrow C_2H_6$	$K_{05}=4.10*10^{-17}$	-0.4	0
$CH_3 + H \rightarrow CH_4$	$K_{06}=7.00*10^{-18}$	0	0
$CH_3 + H \rightarrow CH_2 + H_2$	$K_{07}=1.00*10^{-16}$	0	7600
$CH_2 + H \rightarrow CH + H_2$	$K_{08}=7.70*10^{-16}$	0	0
$C_2H_5 + H \rightarrow C_2H_6$	$K_{09}=6.00*10^{-17}$	0	0

يبين الجدول الجدول II. 2. 1 القيم العددية لثابت السرعة لكل تفاعل عند درجات الحرارة المختلفة T_1 ، T_2 و T_3 ، المحسوبة

بالعلاقة II. 2.

الجدول II. 2. 1 : ثابت السرعة بوحدة " m^3/s ".

$T_1= 1103$ K	$T_2= 1033$ K	$T_3= 973$ K
$K_5=2.42*10^{-17}$	$K_5=2.49*10^{-17}$	$K_5=2.55*10^{-17}$
$K_6=7.00*10^{-18}$	$K_6=7.00*10^{-18}$	$K_6=7.00*10^{-18}$
$K_7=1.01*10^{-19}$	$K_7=6.37*10^{-20}$	$K_7=4.05*10^{-20}$
$K_8=7.70*10^{-16}$	$K_8=7.70*10^{-16}$	$K_8=7.70*10^{-16}$
$K_9=6.00*10^{-17}$	$K_9=6.00*10^{-17}$	$K_9=6.00*10^{-17}$

يكتب معدل الإنتاج أو الاستهلاك (R_k) لكل جزيء أو جذر في معادلة الانتشار باستعمال التفاعلات الكيميائية

الموجودة في الجدول 1.II و الجدول 2. II. بالعلاقة التالية :

- $R_{CH_4} = -K_1 [CH_4] [n_e] - K_2 [CH_4] [n_e] - K_3 [CH_4] [n_e] + K_6 [CH_3] [H]$.
- $R_{CH_3} = K_1 [CH_4] [n_e] - K_5 [CH_3]^2 - K_6 [CH_3] [H] - K_7 [CH_3] [H]$.
- $R_{CH_2} = K_2 [CH_4] [n_e] + K_7 [CH_3] [H] - K_8 [CH_2] [H]$.
- $R_{CH} = K_3 [CH_4] [n_e] + K_8 [CH_2] [H]$.
- $R_H = K_1 [CH_4] [n_e] + K_3 [CH_4] [n_e] + 2 K_4 [H_2] [n_e] - K_6 [CH_3] [H] - K_7 [CH_3] [H] - K_8 [CH_2] [H] - K_9 [C_2H_5] [H]$.
- $R_{H_2} = K_2 [CH_4] [n_e] + K_3 [CH_4] [n_e] + K_7 [CH_3] [H] + K_8 [CH_2] [H]$
- $R_{C_2H_5} = - K_9 [C_2H_5] [H]$.
- $R_{C_2H_6} = K_5 [CH_3]^2 + K_9 [C_2H_5] [H]$.

نعتبر أن الكثافة الالكترونية هي: $n_e = 3.10^{14} m^{-3}$

- $R_{CH_4} = -K_1 C^1 * 3*10^{14} - K_2 C^1 * 3*10^{14} - K_3 C^1 * 3*10^{14} + K_6 C^2 C^5$.
- $R_{CH_3} = K_1 C^1 * 3*10^{14} - K_5 (C^2)^2 - K_6 C^2 C^5 - K_7 C^2 C^5$.
- $R_{CH_2} = K_2 C^1 * 3*10^{14} + K_7 C^2 C^5 - K_8 C^3 C^5$.
- $R_{CH} = K_3 C^1 * 3*10^{14} + K_8 C^3 C^5$.
- $R_H = K_1 C^1 * 3*10^{14} + K_3 C^1 * 3*10^{14} + 2 K_4 C^6 * 3*10^{14} - K_6 C^2 C^5 - K_7 C^2 C^5 - K_8 C^3 C^5 - K_9 C^7 C^5$.
- $R_{H_2} = K_2 C^1 * 3*10^{14} + K_3 C^1 * 3*10^{14} + K_7 C^2 C^5 + K_8 C^3 C^5$.
- $R_{C_2H_5} = - K_9 C^7 C^5$.
- $R_{C_2H_6} = K_5 (C^2)^2 + K_9 C^7 C^5$.

الشروط الابتدائية لتراكيز الجذور و الجزيئات هي :

$$C_{06} = 97.5\% , C_{01} = 2.4\% , C_{02} = C_{03} = C_{04} = C_{05} = C_{07} = C_{08} = 0.00.$$

3.2.11. معامل الانتشار بين نوعين متعادلين كهربائيا [1] :

يتم حساب معامل الانتشار بين نوعين متعادلين كهربائيا (i) و (j) بالعلاقة التالية:

$$D_{ij} = \frac{3}{16} \frac{(4\pi k_{\beta} T_{gas} / 2M_{ij})^{1/2}}{N\pi \sigma_{ij}^2 \Omega_D(\Psi)} \dots \dots \dots (3.11).$$

k_{β} : ثابت بولتزمان.

T_{gas} : درجة حرارة الغاز بوحدة كلفن.

$$N = \frac{P_{tot}}{k_{\beta} T_{gas}} \text{ حيث ان :}$$

P_{tot} : الضغط الكلي للغاز بوحدة البسكال (Pa).

M_{ij} : الكتلة المختزلة بوحدة الكيلوغرام (Kg) : $M_{ij} = M_i M_j / (M_i + M_j)$.

σ_{ij} : قطر ثنائي التصادم بوحدة \AA : $\sigma_{ij} = (\sigma_i + \sigma_j) / 2$

$\Omega_D(\Psi)$: يعطى بالعلاقة التالية :

$$\Omega_D(\Psi) = \frac{A}{\Psi^B} + \frac{C}{e^{D\Psi}} + \frac{E}{e^{F\Psi}} + \frac{G}{e^{H\Psi}}$$

حيث أن :

$$\epsilon_{ij} = (\epsilon_i + \epsilon_j)^{1/2} \quad ; \quad \Psi = T_{gas} / \epsilon_{ij}$$

تعطى القيم العددية للثوابت كالتالي :

$$F=1.52996, E=1.03587, D=0.47635, C=0.19300, B=0.15610, A=1.06036.$$

$$H=3.89411, G=1.76464.$$

يوضح الجدول 3.II القيم العددية لضوابط لينارد جونز (Paramètres Lennard-Jones) واستقطابية

(Polarisabilités) والكتلة كل فرد كيميائي، (تم حساب النتائج من قبل D. Herrebout ورفقائه) [4].

الجدول 3.II : القيم العددية لضوابط لينارد جونز (Paramètres Lennard-Jones) واستقطابية (Polarisabilités)

والكتلة كل فرد كيميائي [4].

الجزء	$\sigma_i (\text{Å})$	$\epsilon_i (\text{K})$	$M_i (\text{Kg})$
CH ₄	3.758	148.6	$16 \cdot 10^{-3} / N_a$
CH ₃	3.620	121.6	$15 \cdot 10^{-3} / N_a$
CH ₂	3.491	95.2	$14 \cdot 10^{-3} / N_a$
CH	3.370	68.6	$13 \cdot 10^{-3} / N_a$
H	2.708	37.0	$1 \cdot 10^{-3} / N_a$
H ₂	2.827	59.7	$2 \cdot 10^{-3} / N_a$
C ₂ H ₅	4.443	215.7	$29 \cdot 10^{-3} / N_a$
C ₂ H ₆	4.443	215.7	$30 \cdot 10^{-3} / N_a$

4.2.II. قانون بلانك (Loi de Blanc) :

إن معامل الانتشار لكل جزيء D_j في خليط الغاز يتم الحصول عليه من قيم D_{ij} باستخدام العلاقة التالية [4]، و

هو القانون بلانك (La loi de Blanc) [3].

$$\frac{P_{tot}}{D_j} = \sum_{i=\text{background}} \frac{P_i}{D_{ij}} \dots \dots \dots (10.II).$$

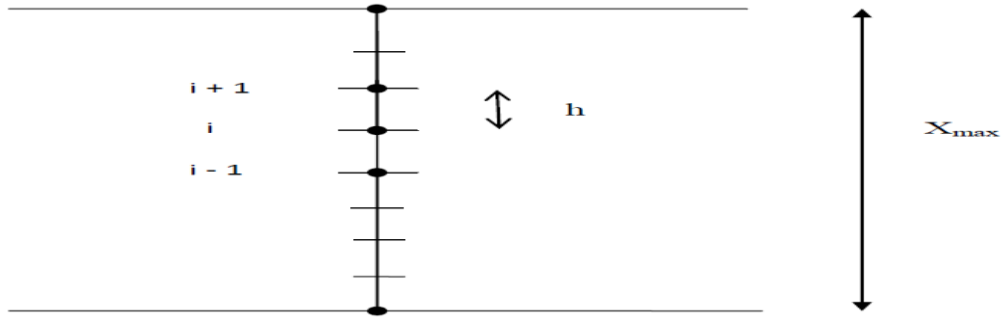
P_{tot} : الضغط الكلي للجزيئات بوحدة Pa.

P_i : الضغط الجزئي للعناصر الكيميائي (i).

5.2.II. حل معادلة الانتشار :

تم حل معادلة الانتشار بطريقة الفروق المنتهية (Méthode des différences finies) [5] :

استعملنا طريقة الفروق المنتهية في حساب تراكيز الجزيئات المنتشرة خلال ترسب طبقة الجرافين بتقنية PECVD .



الشكل 1.II : المفاعل PECVD.

هذه الطريقة تستعمل لإيجاد القيم التقريبية للمشتقات الجزئية لمعادلة الانتشار من خلال معادلات تايلور (Taylor) :

$$f(x + hx) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) \dots (4.II) .$$

$$f(x - hx) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) \dots (5.II).$$

$$\frac{\partial C_i^m}{\partial x} = \frac{C_{i+1}^m - C_i^m}{h} \dots \dots \dots (6.II).$$

$$\frac{\partial^2 C_i^m}{\partial^2 x} = \frac{C_{i-1}^m - 2C_i^m + C_{i+1}^m}{h^2} \dots \dots \dots (7.II).$$

ومن خلال معادلة الانتشار (1. II) و المعادلة (7.II) نتحصل على العلاقة التالية :

$$C_{i-1}^m - 2C_i^m + C_{i+1}^m = \frac{h^2 R_m}{D_m} \dots \dots \dots (8.II).$$

يمكن كتابة هذه العلاقة (8.II) بشكل مصفوفة : (9.II) $A.X = B \dots \dots \dots$

3.II. حساب نسبة التغطية :

II. 1.3. ايزوثرم لونجميير او معادلة لونجميير (Isotherme de Langmuir) :

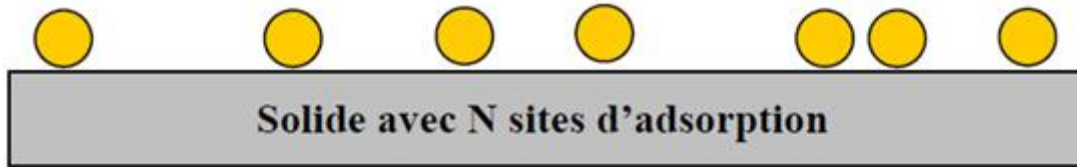
اقترحت النظرية الأساسية الأولى من نظريات الامتزاز للغازات على صلب (ركيزة) بواسطة ايزوثرم لانجميور في عام

1918. ويستند هذا النموذج على ثلاثة افتراضات [6] :

1/ عملية الامتزاز محصورة (محدودة) وتؤدي إلى تشكيل أحادي الطبقة فقط.

2/ يثبت جزئ فقط في كل موقع، ونعتبر السطح متجانس.

3/ لا يوجد تفاعل بين الجزيئات المترسبة.



الشكل II. 2. : توضع الذرات على المواقع لتشكيل طبقة أحادية [6] .

استنتج Mohammed Abdelbassat SLASLI عام 2002 علاقة لايزوثرم لانجميور التي تكتب كالتالي [6] :

$$\theta = \frac{K_L P}{1 + K_L P} \dots \dots \dots (11.II).$$

$$\theta = \frac{N}{N_s} \dots \dots \dots (12.II).$$

N : عدد الذرات المترسبة على سطح الركيزة.

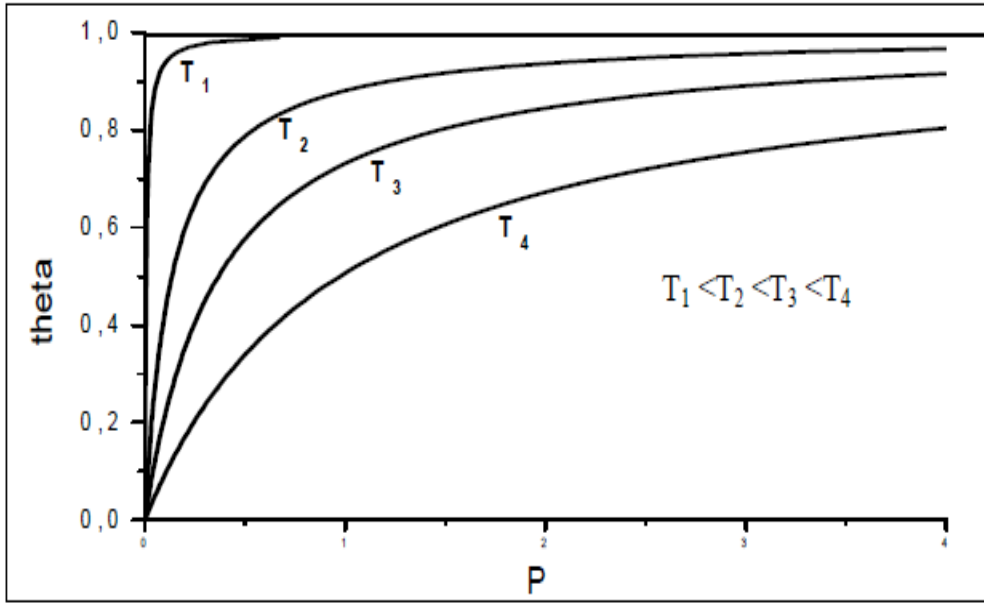
N_s : عدد المواقع على سطح الركيزة.

θ : معدل التغطية (Taux de Recouvrement).

K_L : ثابت لونجميير و يعتمد على درجة الحرارة .

P : ضغط الغاز (Pa) .

يتم الحصول على الامتزاز (معدل التغطية للركيزة) بالعلاقة التالية: $\theta = f(P) \dots (13.II)$ ، حيث يتزايد معدل التغطية بدلالة ضغط الغاز للمفاعل المعزول. كلما زادت درجة حرارة الركيزة تناقص معدل التغطية، يبين الشكل 3.II مثالا على منحنيات لوجميور [7].



الشكل 3.II: معدل التغطية بدلالة ضغط الغاز (منحنيات ايزوثرم لوجميور) [7] و بدلالة درجة الحرارة.

2.3.II. معدل الترسيب على سطح الركيزة (Taux de Déposition):

إن معدل ترسب طبقة رقيقة يعتمد على تراكيز الجذور بالقرب من السطح [8]:

$$R_d = s_{CH_3} \vartheta_{CH_3} + s_{CH_2} \vartheta_{CH_2} + s_{CH} \vartheta_{CH} \dots (14.II).$$

حيث أن:

$$\vartheta_m = \frac{C_{s,m}}{2} \sqrt{\frac{2K_B T}{\pi M_m}} \dots (15.II).$$

ϑ_K : هو معدل التصادم مع سطح الركيزة من خلال نظرية الحركة

$C_{s,K}$: هو تركيز جذر أو جزيء (m) بالقرب من السطح الركيزة (s).

M_m : هو كتلة الجذر أو الجزيء (m).

s_m : معامل الالتصاق للنوع m.

حيث أن :

$$S_{CH_2} = 0.001, S_{CH_3} = 0.028, S_H = 0.0001, S_{CH_4} = 0 [5].$$

3.3.II. حساب عدد المواقع الموجودة على سطح الركيزة (النحاس) :

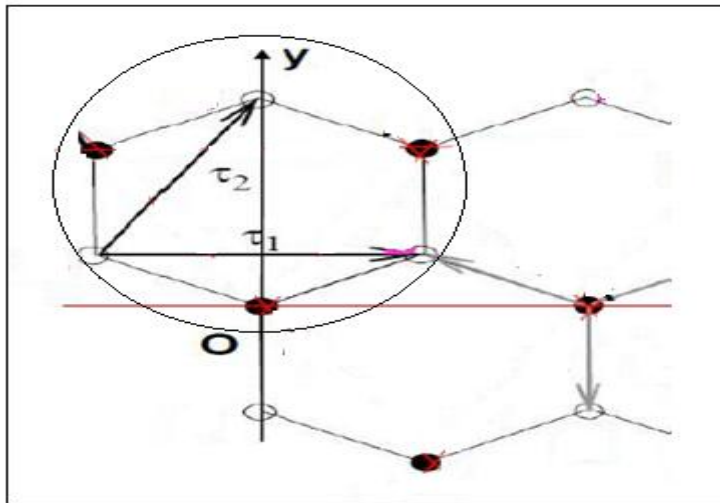
لتحديد عدد المواقع الموجودة على سطح الركيزة يجب اولاً تحديد مساحة خلية واحدة من الجرافين ، ثم تحديد عدد المواقع التي تشغلها ذرات هذه الخلية على سطح الركيزة، وثانياً حساب عدد الخلايا التي تتوضع على مساحة محددة على سطح الركيزة ($1m^2$)، ثم تحديد مجموع عدد المواقع لكل الخلايا السداسية للجرافين ، ويتم تحديد عدد المواقع وفق المعادلة التالية (16.II) :

$$N = 3 \left(\frac{S_{tot}}{S} - 2 \right) + 10 \dots \dots \dots (16.II).$$

حيث ان :

S_{tot} : مساحة الركيزة.

S : مساحة خلية سداسية واحدة للجرافين.



الشكل II.4 أبعاد خلية سداسية للجرافين [9].

$$\tau_1 = \tau_2 = a \sqrt{3} = 2.5 \text{ \AA}, C-C = a = 1.42 \text{ \AA}$$

مراجع الفصل الثاني

- [1] O. Babahani et F. Khelfaoui ; « Calcul des concentrations de molécules et de radicaux lors de déposition de couches minces a-Si:H par procédés PECVD » ; Annales des Sciences et Technologie, Vol. 4 , N° 2 , pp 116-117 (2012) .
- [2] H. O. Kebaili, R. Berrhouma, O. Babahani et F. Khelfaoui ; « Calcul numérique des concentrations des espèces réactives dans un réacteur RF d'un mélange gazeux CH_4/H_2 lors de déposition de couches minces (a-C:H) par procédés PECVD »;SIPP'2015, 16-17 Février 2015, Ouargla (2015).
- [3] M. Mao et A. Bogaerts ; « Investigating the plasma chemistry for the synthesis of carbon nanotubes/nanofibers in an inductively coupled plasma enhanced CVD system: Effect of different gas mixtures»; University of Antwerp (2010).
- [4] D. Herrebout, A. Bogaerts, M. Yan, R. Gijbels , W. Goedheer et E. Dekempeneer ; «One-dimensional fluid model for an rf methane plasma of interest in deposition of diamond-like carbon layers » ; Journal of Applied Physics, **90**, N° 2 , le page 574 (2001).
- [5] R. Berrhouma; «Calcul des densités des espèces chimiques existantes dans la phase gazeuse lors de la déposition d'une couche mince a:C-H par les procédés» ; Mémoire de Master, Université Kasdi Merbah Ouargla (2014).
- [6] M. A. Slasli ,« Modélisation de l'adsorption par les charbons microporeux : Approches théorique et expérimentale » ; thèse de Doctorat , Université de Neuchâtel (2002).
- [7] H. Guesmi ;« Étude Expérimentale et Théorique des mécanismes d'adsorption/désorption de l'Antimoine sur une surface de Silicium (111) » ; thèse de Doctorat , Université Paul Cezanne Aix-Marseille (2005).

[8] O. Babahani ; « Simulation numérique par la méthode de Monte Carlo de la déposition de couches minces par procédés CVD » ; Thèse de Doctorat , Université Kasdi Merbah Ouargla (2013).

[9] E. Moreau ; «Elaboration de graphene par epitaxie par jets moléculaires et caractérisation» ; Thèse Doctorat, Université de Lille Sciences et Technologies (2011).

الفصل الثالث :

مناقشة وتحليل النتائج

الفصل الثالث : مناقشة وتحليل النتائج

III. مقدمة :

في هذا الفصل سوف نقوم بحساب تراكيز الجذور المساهمة في نمو طبقة الجرافين و نسبة التغطية خلال نمو الجرافين

انطلاقاً من الخليط الغازي CH_4 / H_2 في حجم المفاعل، عند درجة حرارة :

$T_1 = 1103K$ ، $T_2 = 1033 K$ و $T_3 = 973 K$ ، حيث أن الضغط الكلي للمفاعل هو : $P_1 = 1.06 Pa$ أو

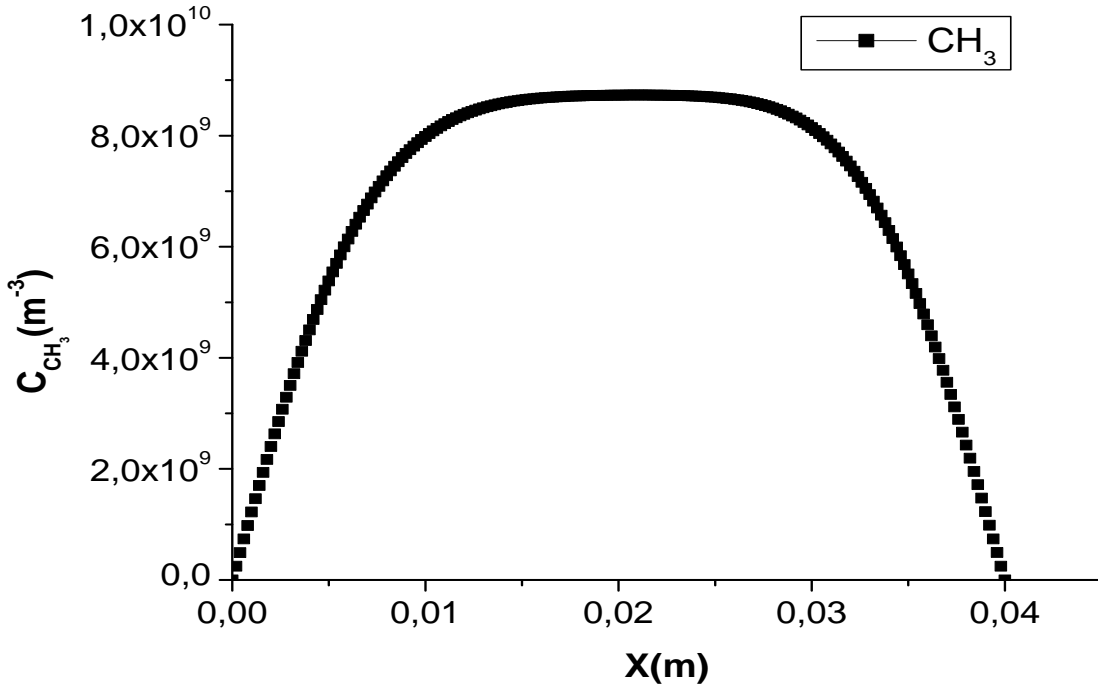
$P_2 = 1.20 Pa$ أو $P_3 = 1.33 Pa$ أو $P_4 = 1.46 Pa$ أو $P_5 = 1.60 Pa$. الكثافة الإلكترونية هي :

$n_e = 310^{14} m^{-3}$ و المسافة بين الأقطاب هي 4سم و الخليط يحتوي على CH_4 بنسبة % 2.43 و H_2 بنسبة % 97.56.

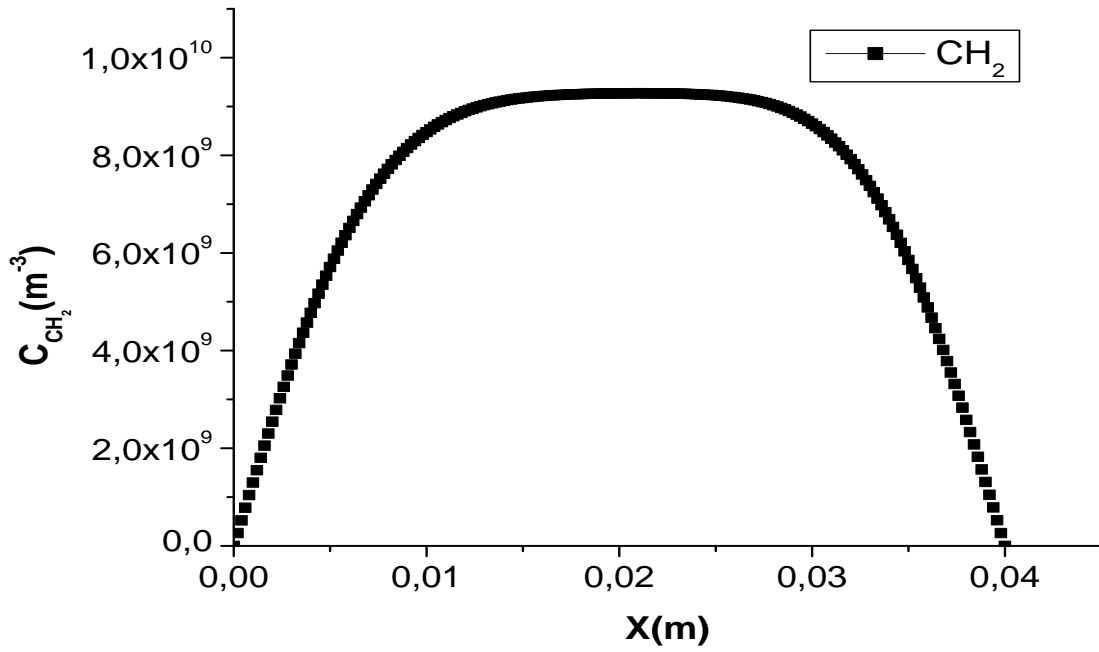
III.1. النتائج عند درجة الحرارة $T_1 = 1103 K$:

III.1.1. تراكيز الجذور المساهمة في نمو طبقة الجرافين عند الضغط $P_3 = 1.33Pa$:

تمثل المنحنيات الاشكال 1.III، الشكل 2.III، الشكل 3.III، تغير تراكيز الجذور بين قطبي المفاعل .

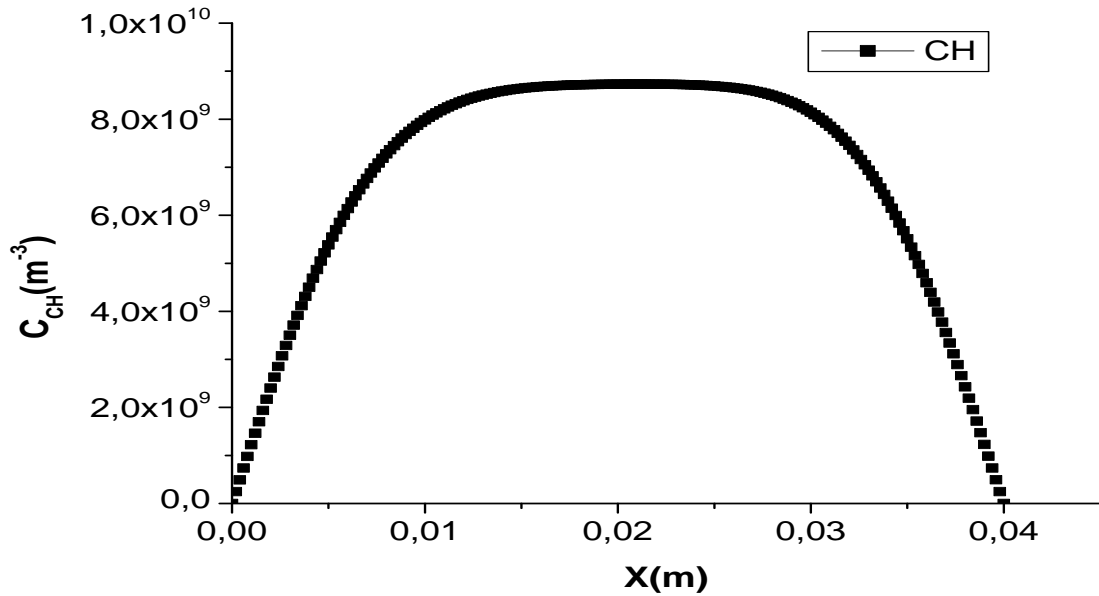


الشكل 1.III : تركيز الجذور CH_3 بدلالة المسافة بين قطبي المفاعل.



الشكل 2.III : تراكيز الجذور CH_2 بين قطبي

التفاعل



الشكل 3.III : تراكيز الجذور CH بين قطبي التفاعل.

نلاحظ أنه في الأشكال : 1.III، 2.III و 3.III تتغير تراكيز الجذور CH ، CH_2 ، CH_3 بنفس الوتيرة في المنحنيات الثلاثة ، حيث أننا نلاحظ انعدام التراكيز عند أطراف المفاعل أما في وسط المفاعل يكون التركيز اعظما يكون تغير تراكيز الجذور المساهمة في نمو الجرافين بين قطبي المفاعل متماثلا في الشكل من اجل قيم الضغط P_1 ، P_2 ، P_3 ، P_4 ، P_5 .

2.1.III. معدل التغطية بالجذور CH ، CH_2 ، CH_3 :

الجدول 1.III يعطي مساحة خلية سداسية واحدة للجرافين و عدد المواقع المتواجدة على مساحة 1 متر مربع من

سطح الركيزة عند درجة الحرارة T_1 .

الجدول 1.III : مساحة خلية سداسية واحدة للجرافين و عدد المواقع المتواجدة على مساحة 1 متر مربع من سطح الركيزة .

S	N_s (Sites)
$5.36 * 10^{-20} m^2$	$5.59 * 10^{19}$

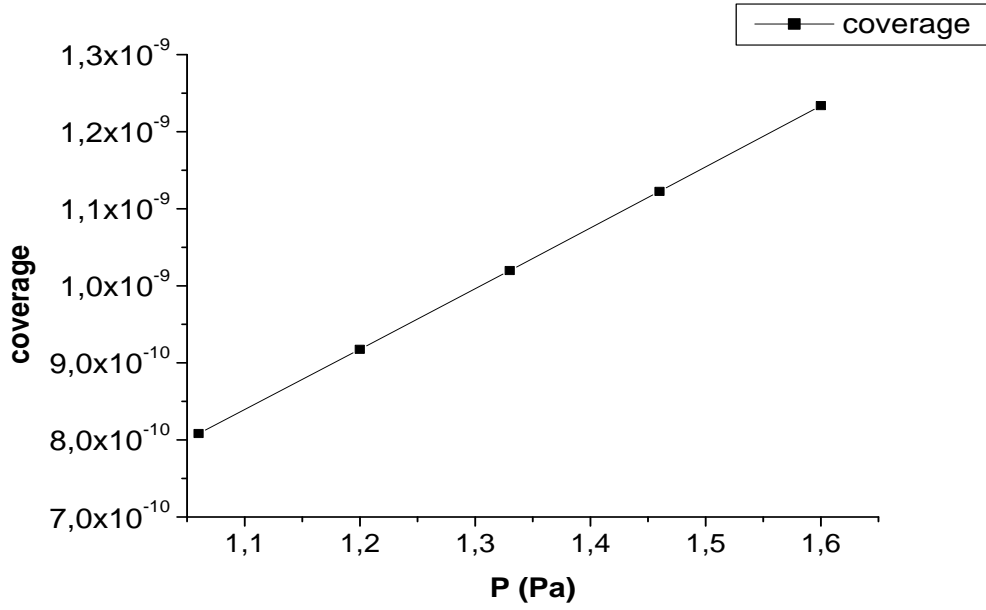
يعطي الجدول 2.III ، تراكيز الجذور المساهمة في نمو الجرافين CH ، CH_2 ، CH_3 بالقرب من سطح الركيزة (على بعد $1.99 * 10^{-4} m$) عند درجة الحرارة T_1 . الضغط الكلي و معدل الترسيب الموافق لكل تجربة رقمية.

الجدول 2. III : ، تراكيز الجذور و الضغط الكلي للغاز و معدل الترسيب.

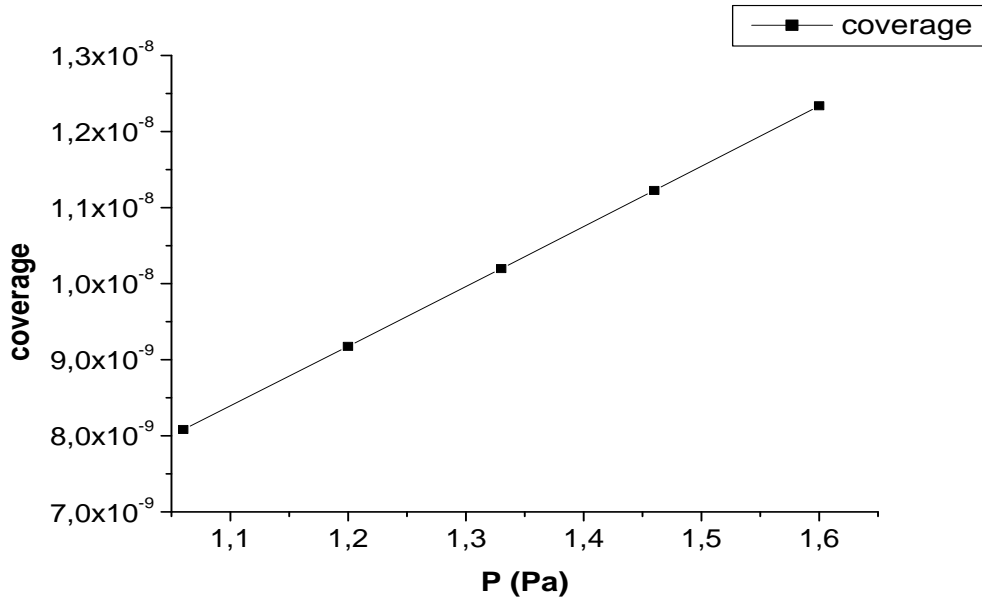
P (Pa)	$C_{CH_3} (m^{-3})$	$C_{CH_2} (m^{-3})$	$C_{CH} (m^{-3})$	$R_d (m^{-2} * s^{-1})$
1.06	$1.96 * 10^8$	$2.05 * 10^8$	$1.96 * 10^8$	$3.76 * 10^9$
1.20	$2.22 * 10^8$	$2.34 * 10^8$	$2.22 * 10^8$	$4.27 * 10^9$
1.33	$2.46 * 10^8$	$2.60 * 10^8$	$2.46 * 10^8$	$4.75 * 10^9$
1.46	$2.70 * 10^8$	$2.88 * 10^8$	$2.70 * 10^8$	$5.23 * 10^9$
1.60	$2.96 * 10^8$	$3.17 * 10^8$	$2.96 * 10^8$	$5.75 * 10^9$

إن عدد الذرات المترسبة تحسب بالعلاقة التالية : III. 4. $N = R_d . \Delta t . \Delta S$.

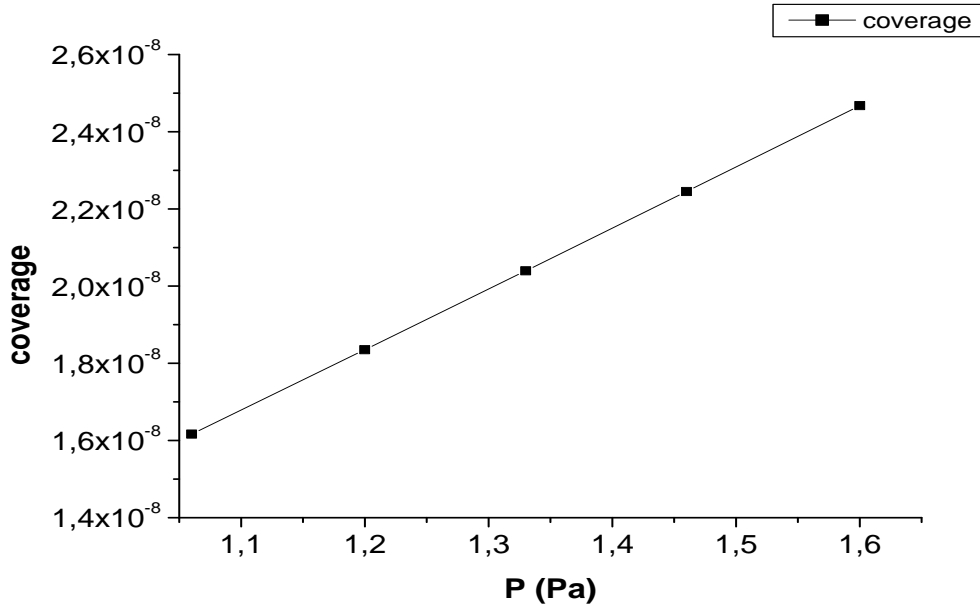
استعمال القيم العددية N_s و N ، قمنا بحساب معدل التغطية عند درجة حرارة 1103K خلال المدة الزمنية 12 ثانية ، 120 ثانية و 240 ثانية .نتائج الحسابات ممثلة في الشكل III. 4 ، الشكل III. 5 و الشكل III. 6 .



الشكل III.4: معدل التغطية بدلالة الضغط خلال مدة زمنية 12 ثانية



الشكل III.5: معدل التغطية بدلالة الضغط خلال مدة زمنية 120 ثانية.



لشكل III.6 : معدل التغطية بدلالة الضغط خلال مدة زمنية 240 ثانية .

نلاحظ في كل من الاشكال الثلاثة III.4 أو III.5 أو III.6 أن معدل التغطية يتزايد وفق خط مستقيم بتزايد الضغط الكلي للمزيج الغازي المستعمل أي أن هناك تناسب طردي بين معدل التغطية والضغط الكلي. عند مقارنة النتائج في الاشكال III.4 و III.5 و III.6 نجد أن معدل التغطية يتزايد كلما زادت المدة الزمنية للتغطية عند نفس الضغط.

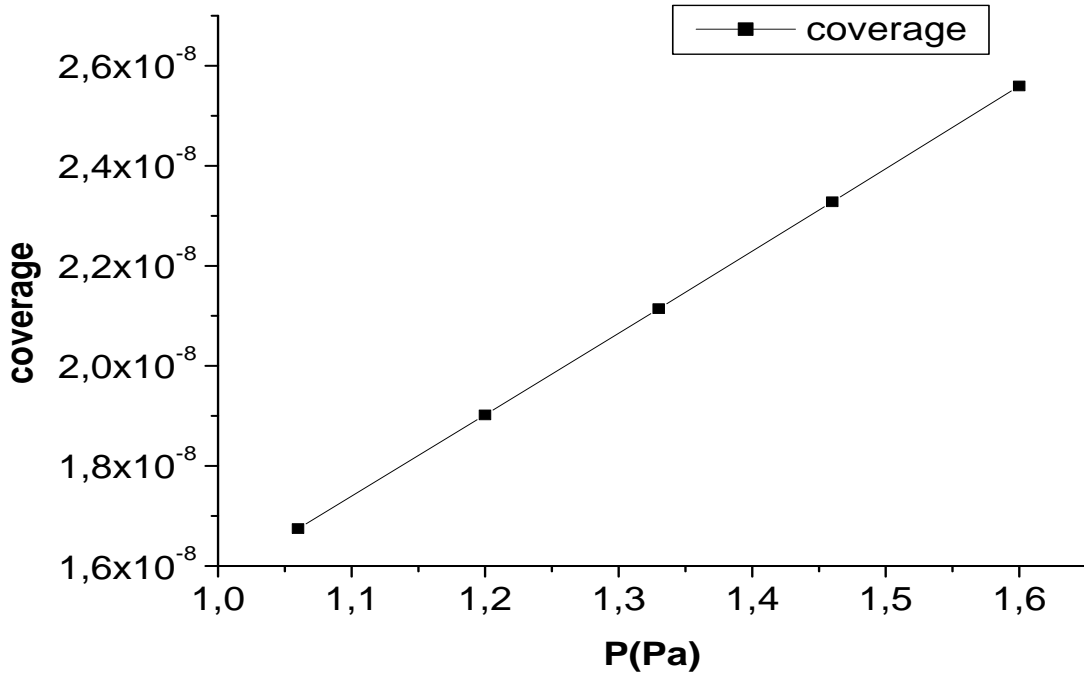
III.2. النتائج عند درجة الحرارة $T_2 = 1033K$:

وبنفس العملية السابقة في حساب معدلات التغطية عند درجة الحرارة T_1 قمنا بحساب معدلات التغطية عند درجة الحرارة T_2 بدلالة متوسط الضغط الجزئي و ذلك من خلال المدة الزمنية 240 ثانية . الجدول III.3 يعطي تراكيز الجذور عند درجة الحرارة T_2 . الجذور المساهمة في نمو الجرافين بالقرب من سطح الركيزة (على بعد $1.99 \times 10^{-4} m$) و معدل الترسيب الموافق لكل تجربة رقمية. يعطي قيم الضغط الكلي.

الجدول 3.III: تراكيز الجذور، معدل الترسيب و الضغط الكلي للغاز.

P (Pa)	C_{CH_3} (m^{-3})	C_{CH_2} (m^{-3})	C_{CH} (m^{-3})	R_d ($m^{-2} * s^{-1}$)
1.06	$2.09 * 10^8$	$2.20 * 10^8$	$2.09 * 10^8$	$3.90 * 10^9$
1.20	$2.37 * 10^8$	$2.51 * 10^8$	$2.37 * 10^8$	$4.43 * 10^9$
1.33	$2.63 * 10^8$	$2.80 * 10^8$	$2.63 * 10^8$	$4.92 * 10^9$
1.46	$2.88 * 10^8$	$3.09 * 10^8$	$2.88 * 10^8$	$5.42 * 10^9$
1.60	$3.16 * 10^8$	$3.41 * 10^8$	$3.16 * 10^8$	$5.96 * 10^9$

7. حساب معدل التغطية عند درجة حرارة 1033K خلال المدة الزمنية 240 ثانية. نتائج الحسابات ممثلة في الشكل III.7.



الشكل III.7: معدل التغطية بدلالة الضغط خلال مدة زمنية 240 ثانية.

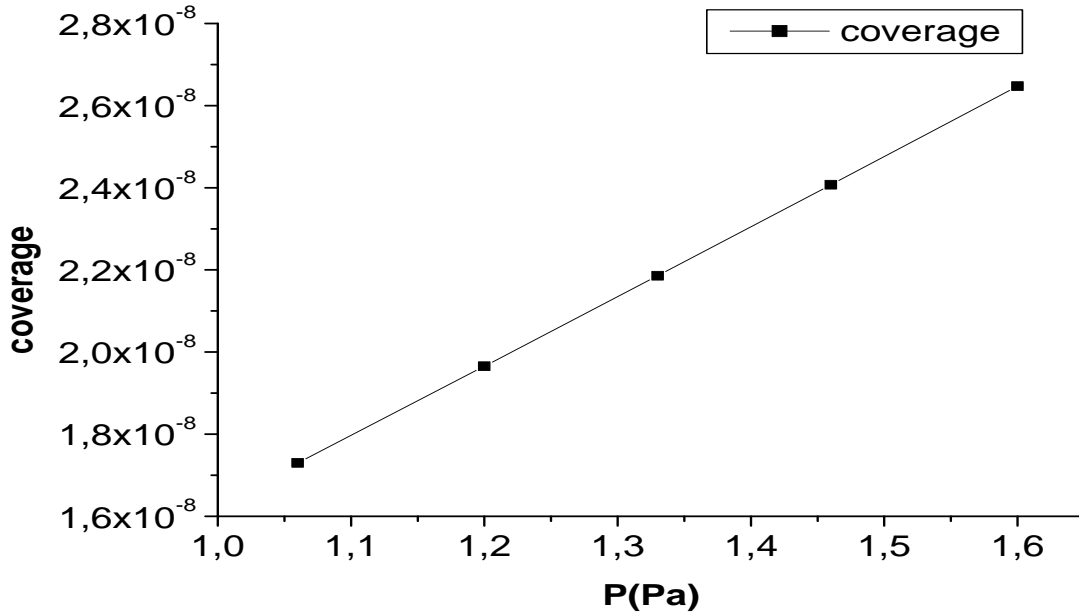
4.III. النتائج عند درجة الحرارة $T_3=973K$.

يعطي الجدول 4.III تراكيز الجذور المساهمة في نمو الجرافين بالقرب من سطح الركيزة (على بعد $1.99 \times 10^{-4}m$) ، قيم الضغط الكلي للغاز و معدل الترسيب الموافق لكل تجربة رقمية.

الجدول 4.III : تراكيز الجذور ، الضغط الكلي للغاز و معدل الترسيب .

P (Pa)	$C_{CH_3} (m^{-3})$	$C_{CH_2} (m^{-3})$	$C_{CH} (m^{-3})$	$R_d (m^{-2} * s^{-1})$
1.06	2.22×10^8	2.35×10^8	2.22×10^8	4.03×10^9
1.20	2.52×10^8	2.68×10^8	2.52×10^8	4.58×10^9
1.33	2.79×10^8	2.99×10^8	2.79×10^8	5.09×10^9
1.46	3.06×10^8	3.31×10^8	3.06×10^8	5.61×10^9
1.60	3.36×10^8	3.65×10^8	3.36×10^8	6.17×10^9

بجساب معدل التغطية عند درجة حرارة 973 K خلال المدة الزمنية 240 ثانية ، نتائج الحسابات ممثلة في الشكل III. 8 .



الشكل III.8 : معدل التغطية بدلالة الضغط خلال مدة زمنية 240 ثانية .

نستنتج من الاشكال 4.III و 7. III و 8. III الموافقة لدرجات الحرارة 1103K، 1033K و 973K على الترتيب ، أن معدل التغطية المأخوذ عند مدة زمنية 12 ثانية يتناسب عكسيا مع درجة الحرارة عند ضغط ثابت وهذا يتوافق مع نتائج المرجع [7] ، كما يوضح الجدول 5.III. الذي يوضح معدل التغطية ودرجة الحرارة الموافقة لها عند ضغط ثابت $P=1.33\text{Pa}$.

الجدول 5.III : معدل التغطية ودرجة الحرارة الموافقة.

P(Pa)	T(K)	θ
1.33 Pa	$T_1 = 1103 \text{ K}$	$1.01 \cdot 10^{-9}$
	$T_2 = 1033 \text{ K}$	$1.05 \cdot 10^{-9}$
	$T_3 = 973 \text{ K}$	$1.09 \cdot 10^{-9}$

نقوم بحساب سرع التغطية (V) وذلك بأخذ قيم معدلات التغطية θ_1, θ_2 الموافقة للمدة الزمنية t_1, t_2 على الترتيب وفق

$$العلاقة التالية : V = \frac{\theta_2 - \theta_1}{t_2 - t_1} ، حيث يعطي الجدول 6.III النتائج المتحصل عليها.$$

الجدول 6.III : سرعة التغطية (V) في شروط معينة :

الثابت	المتغير	سرعة التغطية ($V(s^{-1})$)
P=1.33Pa	$T_1=1103\text{K}$	$V_1 = \frac{1.01 \cdot 10^{-8} - 1.01 \cdot 10^{-9}}{120 - 12} = 8.41 \cdot 10^{-11} s^{-1}$
	$T_2=1033\text{K}$	$V_2 = \frac{1.05 \cdot 10^{-8} - 1.05 \cdot 10^{-9}}{120 - 12} = 8.75 \cdot 10^{-11} s^{-1}$
T=1103K	$P_1=1.33\text{Pa}$	$V_1 = \frac{1.01 \cdot 10^{-8} - 1.01 \cdot 10^{-9}}{120 - 12} = 8.41 \cdot 10^{-11} s^{-1}$
	$P_2=1.06\text{Pa}$	$V_2 = \frac{7.82 \cdot 10^{-9} - 7.82 \cdot 10^{-10}}{120 - 12} = 6.51 \cdot 10^{-11} s^{-1}$

مقارنة نتائج الجدول 6.III نلاحظ أنه عند ضغط ثابت تكون سرعة التغطية متناقصة بتزايد درجة الحرارة أي أن :

$$(V_1 < V_2 \text{ و } T_1 > T_2) ، \text{ أما عند درجة حرارة ثابتة فان سرعة التغطية تتزايد بتزايد الضغط أي أن: } (P_1 > P_2) \text{ و}$$

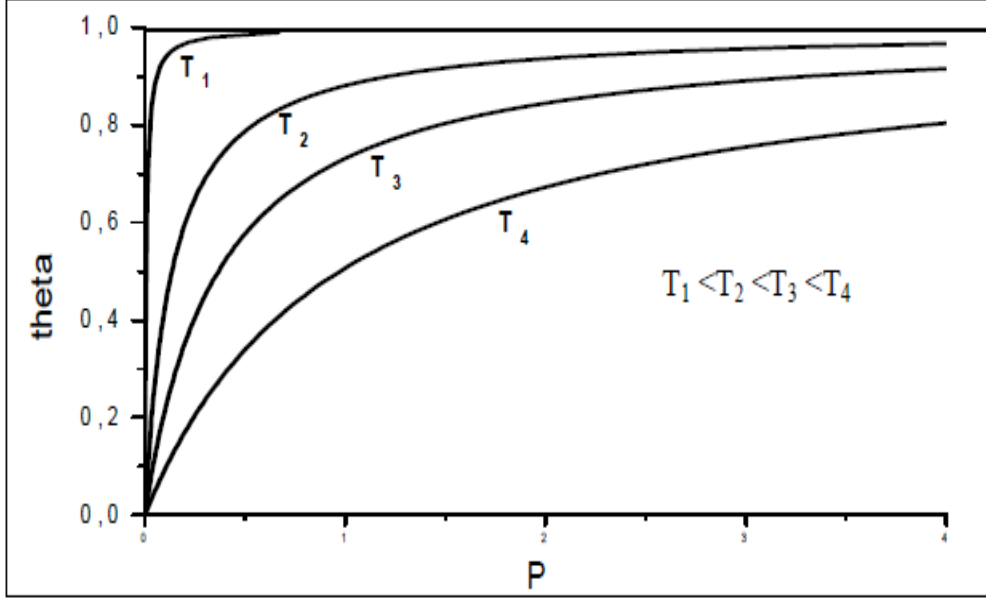
$$(V_1 > V_2) ، \text{ إن نتائج حساب معدلات التغطية ذات رتبة صغيرة جدا مما يجعل المقارنة بينها نسبية.}$$

4.II. المقارنة مع نتائج منحنيات ايزوثرم لانجمير :

نلاحظ ان منحنيات معدل التغطية بدلالة الضغط للغاز تتزايد عند درجة حرارة ثابتة و هذا يطابق الجزء الأول من

منحنيات لانجمير [المراجع [7] ، في الفصل الثاني] ، أما الجزء الثاني والذي يمثل ثبات في قيمة معدل التغطية مع تغير في

الضغط للغاز لم نتحصل عليه لان شكل طبقة الجرافين تتم في ظروف محددة من درجة الحرارة والضغط.



الشكل 9.III : معدل التغطية بدلالة ضغط الغاز (منحنيات ايزوثرم لانجمير) و بدلالة درجة الحرارة [7] .

الخلاصة العامة

الخلاصة العامة

تم عزل مادة الجرافين من الجرافيت مؤخرا في سنة 2004 م. وأصبحت محط اهتمام الكثير من العلماء نتيجة الخصائص التي امتلكتها هذه المادة، حيث تم التوصل إلى أنها مادة استثنائية، لها تطبيقات واسعة متعددة وممتازة، وكذا تطبيقات أخرى لا زالت في قيد الدراسة إلى حد الآن.

في هذه المذكرة درسنا نمو الجرافين بتقنية CVD بتحفيز بالبلازما (PECVD)، واستعمال الخليط الغازي CH_4/H_2 . نسبة غاز الهيدروجين (H_2) في الخليط الغازي هي: **97.56 %**، واما نسبة غاز الميثان (CH_4) هي: **2.43 %** داخل المفاعل. البعد بين اللبوسين هو **4cm**، الضغط الكلي **1mTorr**، الكثافة الالكترونية $n_e = 3 \times 10^{14} \text{m}^{-3}$ ، الجهد متناوب RF ذو تواتر **13,5 MHz**، درجة الحرارة ما بين **973K** إلى **1103 K** ومعدل التسخين لمادة الركيزة هو **3 °C** في كل ثانية، أي **3 °C /s**. لانجاز الدراسة استخدمنا معادلة الانشطار، معادلة لونيومير. قمنا بحساب تراكيز ومعدلات الترسيب للحذور المساهمة في نمو الجرافين: CH ، CH_2 ، CH_3 على سطح الركيزة من خلال حل المعادلة الانشطار بطريقة الفروق المنتهية. للاعتماد على حساب عدد المواقع المتواجدة على مساحة 1m^2 من سطح الركيزة (النحاس) وتوصلنا الى حساب معدل التغطية.

قمنا بحساب معدلات التغطية للركيزة بالجرافين بدلالة كل من الضغط و درجة الحرارة. لاحظنا ان معدل التغطية يتناسب طردا مع ضغط الغاز و يتناسب عكسا مع درجة حرارة الركيزة. أبدت النتائج التي تحصلنا عليها توافقا مع نتائج ايزوترم لونيومير.

يمكن إجراء دراسات أكثر تعمقا للجرافين من حيث تأثير درجة حرارة الركيزة على مختلف خواصه، كما يمكن إجراء

دراسات تجريبية تتعلق بإنتاج الجرافين وتأثير مختلف الشروط الفيزيائية على سرعة النمو وكذا دراسة توضع الجرافين على ركائز أخرى.

المخلص:

الجرافين من المواد الحديثة الاكشاف وهو يمتلك خصائص استثنائية جعلته محط اهتمام الباحثين والصناعيين. من بين الطرق المستعملة في انتاج الجرافين تقنية CVD. نتم في دراستنا هذه بإنتاج الجرافين بتقنية CVD المحفزة بالبلازما PECVD، انطلاقا من الخليط الغازي CH_4/H_2 . إن التفاعلات الكيميائية قرب سطح الركيزة (النحاس) تؤدي الى نمو الطبقة الرقيقة للجرافين .

يتم عملنا هذا بتحديد تراكيز الافراد الكيميائية CH ، CH_2 ، CH_3 المساهمة في نمو الجرافين و حساب معدلات التغطية للركيزة (النحاس). اعتمدنا في دراستنا على معادلة الانشطار و معادلة لونيجمير. للحل العددي لمعادلة الانشطار استعملنا طريقة الفروق المنتهية وبرمجة الحل للطريقة التكرارية غوص-صرايدل لحساب تراكيز الجذور المساهمة في نمو الجرافين. وقمنا بحساب معدلات التغطية من معادلة لونيجمير. إن النتائج المتحصل عليها أبدت توافقا مع نتائج أعمال أخرى.

الكلمات المفتاحية : الجرافين Graphene، تقنية CVD، البلازما، معادلة الانشطار و معادلة لونيجمير.

Résumé

Le graphène est parmi les matériaux découverts récemment. Il a des caractéristiques exceptionnelles. Il a attiré l'attention des chercheurs et des industriels. La technique CVD est parmi les méthodes utilisées dans la production du graphène. Dans cette étude nous nous intéressons à la production du graphène par procédé CVD assisté par plasma (PECVD) à partir d'un mélange gazeux CH_4/H_2 . Les réactions chimiques sèrp de la surface du substrat (cuivre) conduisent à croissance de la couche mince du graphène. Dans notre travail nous avons calculé les concentrations des radicaux CH_3 ، CH_2 et CH contribuant à la croissance du graphène et nous avons calculé le taux de couverture du substrat de cuivre. Nous avons adopté l'équation de diffusion et l'équation Langmuir. Pour la résolution numérique, nous avons utilisé la Méthode des Différences Finies et la Méthode itérative de Gauss-Seidel pour calculer les concentrations des radicaux contribuant à la croissance. Les résultats obtenus ont montré un bon accord avec d'autres travaux.

Mots-clés : le Graphène, technique CVD, le plasma, l'équation de diffusion et l'équation Langmuir.

Summary

Graphene is one of materials recently discovered. It has exceptional features. It drew the attention of researchers and industrialists. The CVD technique is one of the methods used to product Graphene. In this study we are interested in production of Graphene by plasma enhanced CVD (PECVD) from a gas mixture CH_4 / H_2 . The chemical reactions near the surface of the substrate (copper) lead to growth of the thin film of Graphene. In our work we calculated the concentrations of radicals CH_3 ، CH_2 and CH contributing in the growth of Graphene and we calculated the rate of coverage of the copper substrate. We adopted the diffusion equation and Langmuir equation. For the numerical resolution, we used the Method of Finite Differences and the iterative Gauss-Seidel method to calculate the concentrations of radicals contributing in growth. The results obtained showed a good agreement with others works.

Keywords: Graphene, CVD technique, plasma, the diffusion equation and Langmuir equation.